



TITLE:

傾斜した異方的ディラックコーンの ランダウ準位と層間磁気抵抗(修 士論文(2008年度))

AUTHOR(S):

樋村, 隆弘

CITATION:

樋村, 隆弘. 傾斜した異方的ディラックコーンのランダウ準位と層間磁気抵抗(修士論文(2008年度)). 物性研究 2009, 92(2): 151-187

ISSUE DATE:

2009-05-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/169134>

RIGHT:

修士論文 (2008 年度)

傾斜した異方的ディラックコーンのランダウ準位と層間磁気抵抗¹

京都大学大学院 理学研究科 物理学・宇宙物理学専攻 樋村隆弘²

目次

1 序論	152
1.1 物性物理で現われるディラック電子系	152
1.2 本研究の目的	157
1.3 論文の構成	157
2 α -(BEDT-TTF) ₂ I ₃ に対する 2 バンド模型	158
2.1 平均場ハミルトニアン	158
2.2 一般化ワイル方程式	160
2.3 簡略化された傾いたワイル方程式	162
3 傾いたディラックコーンにおけるランダウ準位波動関数	163
3.1 磁場下でのハミルトニアン	163
3.2 傾きがある場合の厳密解	165
3.3 対称ゲージの場合	170
3.4 ランダウゲージの場合	173
4 傾いたディラックコーンにおける面間磁気抵抗	176
4.1 久保公式	176
4.2 z 軸方向の電流密度演算子	177
4.3 ゼロモード内の遷移の効果	180
5 結論	185

¹ 本稿は、京都大学大学院 理学研究科 物理学第一分野に修士論文として提出した原稿を、本誌掲載のために改編したものである。カラー版については以下を御覧下さい。

<http://www2.yukawa.kyoto-u.ac.jp/~himura/2009/bussei/>

²E-mail: himura@yukawa.kyoto-u.ac.jp

1 序論

近年、固体中において電子が相対論的ディラック粒子として振る舞う系が注目を集めている。特にグラファイトの単層系であるグラフェンの試料作成が可能になり [1, 2]、さらにディラック電子系で予言されていた半整数量子ホール効果が実験的に観測 [3] されたことで、2 次元ディラック電子系の研究が飛躍的に発展した。この系ではフェルミ面において価電子バンドと伝導バンドが相異なる 2 点で接触し、そのまわりで線形なバンド分散を持つ。そのためグラフェン中の電子は質量を持たない場合のディラック方程式によって記述される相対論的電子となる。このような電子系はディラック電子系と呼ばれ、その線形なバンド分散は、二つの円錐が一点で接触し、互に向かい合った形をしておりディラックコーンと呼ばれている。

グラフェンの他には、有機導体である α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ においても、高圧下においてディラックコーンを持つことが示唆されている [4, 5]。この系はバルク物質でありながら、伝導を担う BEDT-TTF 分子の層と絶縁層の I $_3$ 層が交互に積み重なった層状構造を持つため 2 次元電子系の特徴を持っている。

本章ではグラフェンの電子構造を強束縛近似で求め、ディラック電子系が持つ性質を示す (1.1.1 節)、(1.1.2 節)。また、 α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ の特徴について説明する (1.1.3 節)。1.2 節で本研究の目的を述べる。

1.1 物性物理で現われるディラック電子系

1.1.1 グラフェンの電子状態

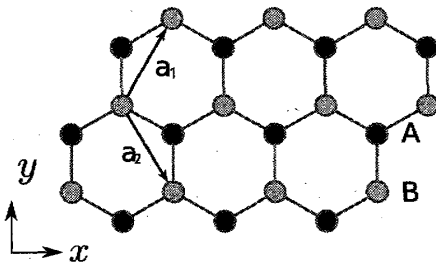


図 1: グラフェンの蜂の巣型格子

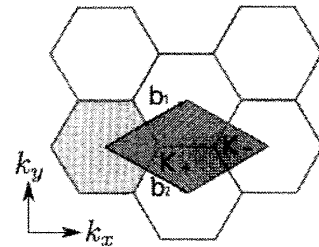


図 2: グラフェンの逆格子空間

グラフェンは炭素原子が蜂の巣型格子状に結合した二次元電子系であるため、図 1 に示すように、単位格子には 2 つの原子があり、それぞれ三角格子状の副格子 A, B を成している。基本並進ベクトル $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ は

$$\mathbf{a}_1 = \sqrt{3}a \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right), \quad \mathbf{a}_2 = \sqrt{3}a \left(\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2} \right) \quad (1)$$

で与えられる。 a は最近接の炭素原子間の距離 $a = 1.42 \text{ \AA}$ である。全ての A 原子の位置ベクトルは $\mathbf{r} = \mathbf{a}_1 n_1 + \mathbf{a}_2 n_2$ (n_1, n_2 は整数) で指定される。これらの A 原子は、最近接の B 原子と次

の 3 つのベクトル δ_i によって結ばれる

$$\delta_1 = (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)/3, \quad \delta_2 = (\mathbf{a}_1 + 2\mathbf{a}_2)/3, \quad \delta_3 = -\delta_1 - \delta_2 \quad (2)$$

逆格子ベクトルは

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a} \left(1, \frac{1}{\sqrt{3}}\right), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a} \left(1, -\frac{1}{\sqrt{3}}\right) \quad (3)$$

である。図 2 において影を付けた六角形は第一 Brillouin 領域をあらわす。

炭素原子の $2s, 2p_x, 2p_y$ 軌道により 3 個の sp^2 混成軌道が形成され、それらの共有結合により炭素原子が蜂の巣型の格子を成している。残った $2p_z(\pi)$ 軌道は面に垂直であり、隣合う原子間において重なり合い伝導電子として振る舞う。

この π バンドを強束縛近似によって求める。最近接原子間の飛び移りのみを考えると、ハミルトニアンは、

$$H_0 = -t \sum_{j \in A} \sum_{\sigma} \sum_{\delta_i = \delta_1, \delta_2, \delta_3} (a_{j,\sigma}^\dagger b_{j+\delta_i,\sigma} + h.c.) \quad (4)$$

と書ける。ここで、 j は格子点を表わす。 $a_{i,\sigma}^\dagger$ は、副格子 A に属する格子点 i におけるスピン σ を持つ π 電子の生成演算子であり、副格子 B に対しても同様に $b_{i,\sigma}^\dagger$ を定義する。 t は最近接原子間の飛び移り積分を表わし、グラフェンでは $t \simeq 3.0$ eV と見積られている。また、 N を副格子点の総数として $a_{i,\sigma}, b_{i,\sigma}$ のフーリエ変換

$$\begin{aligned} a_{j,\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k a_{k,\sigma} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} \quad (j \in A), \\ b_{j,\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k b_{k,\sigma} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} \quad (j \in B) \end{aligned} \quad (5)$$

より、ハミルトニアンは

$$H_0 = -t \sum_k \sum_{\sigma} \left(a_{k,\sigma}^\dagger b_{k,\sigma} \sum_{\delta_i = \delta_1, \delta_2, \delta_3} e^{i\mathbf{k} \cdot \delta_i} + h.c. \right) \quad (6)$$

と書ける。これを対角化するために 2 成分スピノール

$$\psi_\sigma(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} a_{k,\sigma} \\ b_{k,\sigma} \end{pmatrix} \quad (7)$$

を導入しよう。このとき、運動量表示におけるハミルトニアン H_0 は

$$H_0 = \sum_{\sigma} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \psi_\sigma^\dagger(\mathbf{k}) \mathcal{H}_0 \psi_\sigma(\mathbf{k}), \quad \mathcal{H}_0 = \begin{pmatrix} 0 & f(\mathbf{k}) \\ f^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} \quad (8)$$

である。積分は図 2 の影を付けた菱形の領域について行なう。ここで、 $f(\mathbf{k})$ は (1) 式の基底を用いて

$$\begin{aligned} f(\mathbf{k}) &= -t \sum_{\delta_i} e^{i\mathbf{k} \cdot \delta_i} = -t e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)/3} (1 + e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1}) \\ &= -t \left[\exp\left(i \frac{k_y a}{\sqrt{3}}\right) + 2 \exp\left(-i \frac{k_y a}{2\sqrt{3}}\right) \cos \frac{k_x a}{2} \right] \end{aligned} \quad (9)$$

で与えられる。エネルギー分散は

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm|f(\mathbf{k})| = \pm t \sqrt{1 + 4 \cos^2 \frac{k_x a}{2} + 4 \cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{\sqrt{3} k_y a}{2}} \quad (10)$$

エネルギー分散 $E_{\pm}(\mathbf{k})$ は Brillouin 領域の $\pm 2\pi/a(1/3, 1/\sqrt{3})$, $\pm 2\pi/a(2/3, 0)$, $\pm 2\pi/a(1/3, -1/\sqrt{3})$ において $E_{\pm}(\mathbf{k}) = 0$ となり、そのまわりで線形な分散を持つ。これら 6 つの点のうち、非等価なものは 2 つのみであり、それらを、 $K_{\pm} = \pm 2\pi/a(2/3, 0)$ ととる (図 2)。これらの K_{\pm} 点のまわりで (9) 式は $f(K_{\pm} + \mathbf{p}) \simeq \pm v_F(p_1 \mp p_2)$ と展開することができる。したがって、ハミルトニアン (8) 式は線形化され

$$H_0 \simeq \sum_{\sigma} \int \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} [\psi_{\sigma}^{\dagger}(K_+ + \mathbf{p}) \mathcal{H}_{K_+}(\mathbf{p}) \psi_{\sigma}(K_+ + \mathbf{p}) + \psi_{\sigma}^{\dagger}(K_- + \mathbf{p}) \mathcal{H}_{K_-}(\mathbf{p}) \psi_{\sigma}(K_- + \mathbf{p})] \quad (11)$$

と表わされる。ここで、 K_{\pm} 点におけるハミルトニアン密度 \mathcal{H} は

$$\mathcal{H}_{K_+}(\mathbf{p}) = \hbar v_F(\tau_1 p_1 + \tau_2 p_2), \quad \mathcal{H}_{K_-}(\mathbf{p}) = \hbar v_F(-\tau_1 p_1 + \tau_2 p_2). \quad (12)$$

ここで、 $\tau_{\mu}(\mu = 1, 2, 3)$ は副格子空間に作用するパウリ行列を表わす。

この線形化されたハミルトニアンを 2 成分スピノール (7) をまとめた 4 成分スピノール

$$\Psi_{\sigma}(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} \psi_{\sigma}(K_+ + \mathbf{p}) \\ \psi_{\sigma}(K_- + \mathbf{p}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{\sigma}(K_+ + \mathbf{p}) \\ b_{\sigma}(K_+ + \mathbf{p}) \\ b_{\sigma}(K_- + \mathbf{p}) \\ a_{\sigma}(K_- + \mathbf{p}) \end{pmatrix} \quad (13)$$

を用いて表わそう。その結果、ハミルトニアン (8) は

$$\begin{aligned} H_0 &\simeq \hbar v_F \sum_{\sigma} \int \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{p}) \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y & 0 & 0 \\ p_x + ip_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -p_x + ip_y \\ 0 & 0 & -p_x - ip_y & 0 \end{pmatrix} \Psi_{\sigma}(\mathbf{p}) \\ &= \hbar v_F \sum_{\sigma} \int \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{p}) [\eta_z \otimes (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})] \Psi_{\sigma}(\mathbf{p}) \end{aligned} \quad (14)$$

と表わされる。ここで、 η_z は valley 空間 (K_+, K_-) に作用し、

$$\eta_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (15)$$

と書ける。

1.1.2 カイラリティ

$\psi_{\sigma}(K_{\pm}+\mathbf{p}) = \psi_{K_{\pm},\sigma}(\mathbf{p})$ として 2 成分スピノール $\psi_{K_{\pm},\sigma}(\mathbf{p})$ を導入すると、 $\mathcal{H}_0\psi_{K_{\pm}}(\mathbf{p}) = \pm E_{\mathbf{p}}\psi_{K_{\pm}}(\mathbf{p})$, $E_{\mathbf{p}} = \hbar v_F|\mathbf{p}|$ より、2 成分スピノール $\psi_{K_{\pm},\sigma}(\mathbf{p})$ に対するワイル方程式

$$\begin{aligned}\hbar v_F(\tau_1 p_1 + \tau_2 p_2)\psi_{K_{+},\sigma}^{e,h}(\mathbf{p}) &= \pm E_{\mathbf{p}}\psi_{K_{+},\sigma}^{e,h}(\mathbf{p}), \\ -\hbar v_F(\tau_1 p_1 + \tau_2 p_2)\psi_{K_{-},\sigma}^{e,h}(\mathbf{p}) &= \pm E_{\mathbf{p}}\psi_{K_{-},\sigma}^{e,h}(\mathbf{p})\end{aligned}\quad (16)$$

を得る。ここで上付き符号は電子に対応し、下付きはホールにそれぞれ対応している。これらの解は $\tan \varphi = \frac{p_y}{p_x}$ とおくと K_{+} では

$$\psi_{K_{+},\sigma}^e(\mathbf{p}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2} \\ e^{i\varphi/2} \end{pmatrix}, \quad \psi_{K_{+},\sigma}^h(\mathbf{p}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -e^{-i\varphi/2} \\ e^{i\varphi/2} \end{pmatrix}\quad (17)$$

K_{-} では

$$\psi_{K_{-},\sigma}^e(\mathbf{p}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2} \\ -e^{i\varphi/2} \end{pmatrix}, \quad \psi_{K_{-},\sigma}^h(\mathbf{p}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2} \\ e^{i\varphi/2} \end{pmatrix}\quad (18)$$

これらは、副格子に対応するパウリ行列 τ_{μ} ($\mu = x, y$) を用いて定義されたカイラリティ(ヘリシティ)演算子

$$\hat{h} = \frac{\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\tau}}{|\mathbf{p}|}\quad (19)$$

の固有状態であり、 K_{+} において、電子に対しては $\hat{h}\psi_{K_{+}}^e = +\psi_{K_{+}}^e$ 、一方ホールに対しては $\hat{h}\psi_{K_{+}}^h = -\psi_{K_{+}}^h$ である。また、 K_{-} においては、電子に対しては $\hat{h}\psi_{K_{-}}^e = -\psi_{K_{-}}^e$ 、一方ホールに対しては $\hat{h}\psi_{K_{-}}^h = +\psi_{K_{-}}^h$ となる。

また、この波動関数は副格子空間における“スピン” $\frac{1}{2}$ のスピノールであり、 $\varphi + 2\pi$ の回転によって $\psi \rightarrow -\psi$ と変換される。電子が閉曲線上を移動する際に波動関数の符号が反転しなければならないためベリー位相 π を持つことがわかる。

1.1.3 α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$

一般的に、有機導体は温度や圧力を変えることによって、モット絶縁体や電荷秩序状態、超伝導などの幅広い電子状態を持つことが知られている [6, 7]。有機導体において伝導を担う電子の軌道は等方的ではないため、2 つの分子間における電子の軌道の重なりが方向によって異なる。そのため有機導体は低次元導体としての性質を持ちやすい。

この論文で議論する α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ は、擬二次元電子系である (BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ 塩の一種である。BEDT-TTF (bis(ethylene-dithio)tetrathiafulvalene) と、I $_3$ の分子構造を図 3 に示す。 α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ の伝導層における BEDT-TTF 分子は図 5 のように並んでいる。(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ は図 4 のように、伝導層である BEDT-TTF 面と、絶縁層である I $_3$ 塩による層が交互に重なった結晶構造を持っている。

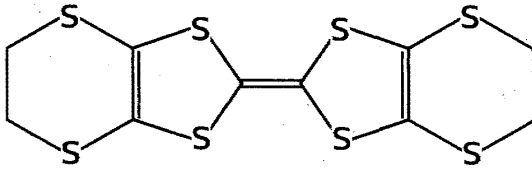
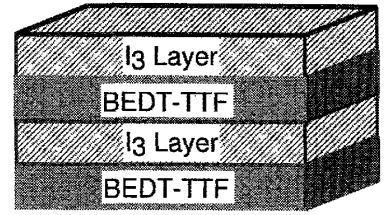

 図 3: BEDT-TTF 分子と I_3 分子。


図 4: BEDT-TTF 導体の層状構造

この系は、大気圧下では $T_{MI} = 135K$ で金属-絶縁体転移を起こす。また、静水圧下では T_{MI} は減少し、20 kbar で金属-絶縁体転移は消失し、抵抗値は温度によらず 300 K から 1.5 K の間ではほぼ一定になる。温度上昇によってキャリア密度が増加する一方でキャリア移動度は減少し、300 K において、キャリア密度は 10^{21} cm^{-3} 、移動度は $10^{-1} \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ であり、1.5 K においては、キャリア密度は 10^{15} cm^{-3} 、移動度は $10^5 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ である [8]。また、 a -軸方向における一軸性の圧力下においても同様の現象が観測された [9]。このような温度依存性は、この系が非常に小さなバンドギャップを持つナローギャップ半導体であり、また、フェルミ準位近傍で状態密度が $D(\epsilon) \propto \pm\epsilon$ となるため、キャリア密度が $n = \int D(\epsilon)f(\epsilon)d\epsilon \propto T^2$ のように T^2 に比例するためと考えられていた。

バンド計算の結果、 a -軸方向の一軸性圧力下で、この系はナローギャップ半導体ではなくゼロギャップ半導体であることが示唆された [4, 5]。小林らは、このバンド分散はフェルミ面近傍で質量がゼロのディラック粒子と同様に線形であるが、大きく傾いており、その分散は、質量ゼロのディラック粒子を記述するワイル方程式に新しい項を付け加えた傾斜した異方的なワイル方程式

$$H_{\text{eff}}(\mathbf{k}) = \sum_{\rho=x,y,z,0} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_\rho) \sigma_\rho \quad (20)$$

で記述され、エネルギー分散は

$$E(\mathbf{k}) = \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_0 \pm \sqrt{\sum_{i=1,2,3} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_i)^2} \quad (21)$$

となることを示唆した [10]。ここで $\sigma_\mu (\mu = x, y, z)$ はパウリ行列を表わし、 σ_0 は単位行列である。また、 α -(BEDT-TTF) $_2I_3$ のディラックコーンが傾斜していることは、第一原理計算から示唆されている [11]。

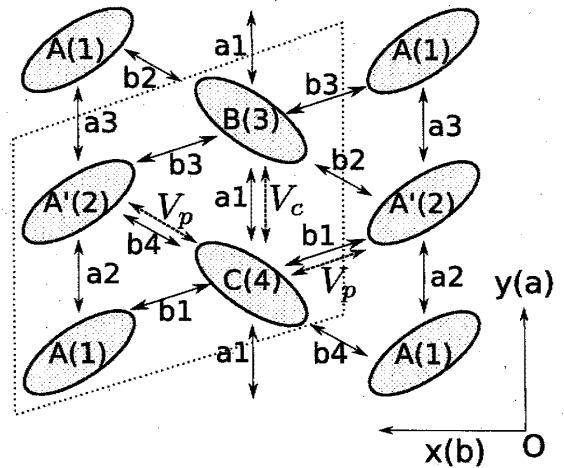


図 5: α -(BEDT-TTF) $_2I_3$ 系のモデル。単位格子は図中の点線で示した。BEDT-TTF 分子 A, A', B, C と、それらの間のトランスファー積分 t_A ($A = a1, a2, a3, b1, \dots, b4$) を示した。最近接斥力相互作用は V_a, V_b で与えられる。ここでは a -軸と b -軸はそれぞれ、 y -軸と x -軸とした。

グラフェンにおける電子の低エネルギー励起がディラック粒子として記述できることは、ディラック波動関数の持つベリー位相により、ホール伝導率が $4(n + \frac{1}{2})\frac{e^2}{h}$ (n は整数 及び 因子 4 はスピンと valley の縮退度) に量子化された半整数量子ホール効果が観測されたことによって示されている [3, 12]。また、角度分解光電子分光を用いた実験によってディラックコーンが直接観測されている [13]。

一方で、有機導体においては、フェルミ準位近傍から放出される光電子が無機金属と比べてはるかに少ないため、現時点においては角度分解光電子分光の測定に成功していない。また、量子ホール効果についても未だ観測はされていない。

しかし α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ が質量ゼロのディラック電子で記述できることは、層間抵抗の磁場依存性の測定によって裏付けられている。二次元面に垂直な磁場下において層間抵抗を測定したところ、層間抵抗が磁場の増加に対して減少する負の磁気抵抗を示すことが田嶋らによって観測された [14]。この現象は、各々の伝導層においてランダウ量子化したディラック電子がトンネル効果によって遷移する描像で説明することができることが長田によって理論的に示された [15]。質量を持たないディラック粒子は、副格子に対応する“スピン” $\frac{1}{2}$ により、余分なベリー位相 π を持つ。このためランダウ準位がシフトし、フェルミ準位に位置するコンタクトポイント $E = 0$ において、 $n = 0$ のランダウ準位が出現するという特徴がある。このディラック電子特有のランダウ準位は、ゼロモードランダウ準位と呼ばれる。ランダウ準位の縮退度が磁場の増加とともに増大するため、状態密度が増加し層間抵抗が減少する。

1.2 本研究の目的

前述の長田による層間磁気抵抗の計算 [15]、および田嶋らの実験 [14] は α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ がディラック電子系であることを強く示唆するものである。一方で、 α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ が傾いたディラックコーンを持つことは未だ実験的に確かめられてはいない。磁場中での電子の振舞いはディラックコーンの傾きの影響を受けると考えられるため、層間磁気抵抗に傾きによる効果が現れることが期待される。したがって、ディラックコーンが傾いていることを層間磁気抵抗の測定から確かめられる可能性がある。また、その実験値より傾きのパラメータを決定できる可能性がある。

本研究では、傾いたディラックコーンにおける層間磁気抵抗の表式を求め、それが傾きによって、どのように変化するかを調べる。また、層間磁気抵抗の実験値より、傾きのパラメータを決定する方法について議論する。

1.3 論文の構成

まず、第 2 章では強束縛近似を用いて α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ のバンドを求める。クーロン相互作用は平均場近似により取り扱う。また、そのバンド分散よりその有効ハミルトニアンが、一般化されたワイル方程式で記述されることを示し、そのパラメータの決定方法について示す。第 3 章

では傾斜したワイル方程式におけるランダウ準位波動関数の厳密解を求め、それが傾きの効果によってどのように変化するかを示す。第4章では、第3章で求めた波動関数と久保公式を用いて層間磁気抵抗の計算を行なった。また、層間磁気抵抗の磁場方向依存性を調べることで、傾きのパラメータを推定できることを示す。

2 α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ に対する 2 バンド模型

1.1.3 節で述べたように α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ は高圧下でゼロギャップ半導体となり、そのバンド分散は傾いたディラックコーンを持つ。ディラックコーンの傾きが面間磁気抵抗に及ぼす影響を議論するにあたり、 α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ 中に現われる傾いたディラックコーンを記述する有効モデルを知る必要がある。

この章では、小林らによって示された、 α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ の有効モデルである一般化ワイル方程式、および、そのパラメータを求める方法を述べる [10]。

2.1 平均場ハミルトニアン

α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ は図5に示したように、単位包中に4つのBEDT-TTF分子を含み、それぞれの分子を A, A', B, C とする。また、4つの分子に対して電子は6つ存在し、4バンドの $\frac{3}{4}$ が満たされる。ハミルトニアンは拡張ハバード模型

$$H = \sum_{(i\alpha;j\beta),\sigma} t_{i\alpha;j\beta} a_{i\alpha,\sigma}^\dagger a_{j\beta,\sigma} + \sum_{i\alpha} U a_{i\alpha,\uparrow}^\dagger a_{i\alpha,\downarrow}^\dagger a_{i\alpha,\downarrow} a_{i\alpha,\uparrow} \\ + \sum_{(i\alpha;j\beta),\sigma,\sigma'} V_{\alpha\beta} a_{i\alpha,\sigma}^\dagger a_{i\alpha,\sigma'}^\dagger a_{i\alpha,\sigma'} a_{i\alpha,\sigma} \quad (22)$$

で表わされる。ここで、 $i, j = 1, \dots, N_L$ は格子点を表わすインデックスであり、 N_L は格子点の総数である。 $\alpha, \beta = 1, 2, 3, 4$ は単位格子中のBEDT-TTF分子のサイトを表わすインデックスである。 $a_{i\alpha,\sigma}^\dagger$ は (i, α) サイトにおけるスピン $\sigma = \uparrow, \downarrow$ を持つ電子の生成演算子である。また、 $t_{i\alpha;j\beta}$ は (i, α) サイトと (j, β) サイト間の飛び移り積分を表わす。 U は on-site の斥力クーロン相互作用であり、 $V_{\alpha\beta}$ は最近接斥力相互作用である。

一軸性の圧力下における飛び移り積分 t の圧力依存性は次のように外挿して求める。 P_a, P_b は、それぞれ a, b 軸方向の圧力を表わす。

$$t_A(P_a) = t_A(0)(1 + K_A P_a), \\ t'_A(P_b) = t_A(0)(1 + K'_A P_b) \quad (23)$$

$t_A(P_a)$ ($t'_A(P_b)$) は a -軸 (b -軸) 方向に圧力 P_a (P_b) を掛けた場合の飛び移り積分を表わす。ここで、 $A = a1, a2, a3, b1, \dots, b4$ であり、これらは図5に示したように、分子間の飛び移りに対する指標である。これらの値は室温において、大気圧下 ($P_a = P_b = 0$)、ならびに a -軸方向に 2.0 kbar の圧力を掛けた場合と b -軸方向に 3.0 kbar の場合に X 線回折による実験値 [16] により求められ

た飛び移り積分の値を外挿して求める。また、最近接斥力相互作用 $V_{\alpha\beta}$ は a, b 軸方向のものをそれぞれ V_a, V_b とおいた。 ^{13}C -NMR の実験において、 α -(BEDT-TTF) $_2\text{I}_3$ は電荷不均化を起こし、 A, C サイトの平均電荷数は A', B サイトの平均電荷数よりも多いことが知られている [17, 18]。

平均場近似を用いた研究により、電荷は U, V の値によってさまざまなパターンを持つことがわかっている [19]。しかし、最近接斥力相互作用を等方的、すなわち $V_{\alpha\beta} = V$ とした場合には実験と一致しない [4]。したがって、 $V_a \neq V_b$ とする。

ゼロギャップ状態は高圧下 ($P_a > 4.3$ kbar) において電荷不均化と共存して存在し、絶縁相 ($0 \leq P_a < 3.3$ kbar) および金属相 ($3.3 \leq P_a < 4.3$ kbar) はストライプ型の電荷秩序を持つ。クーロン相互作用のパラメータ U, V は eV 単位で、 $U = 0.4, V_c = 0.17, V_p = 0.05$ と選んだ [20]。このとき、電荷秩序のパターンは実験 [17] とよく一致し、圧力による状態変化もまた実験 [9] と同様の振舞いを示した。

消滅演算子 $a_{i\alpha\sigma}$ のフーリエ変換

$$a_{i\alpha\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N_L}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} a_{\mathbf{k}\alpha\sigma} \quad (24)$$

を用いて (22) 式を書き直すと

$$\begin{aligned} H = & \sum_{\mathbf{k}, \sigma, \alpha, \beta} \epsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}\alpha\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\beta\sigma} + \frac{1}{N_L} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}, \alpha, \beta} U_{\alpha\beta} a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\alpha\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\beta\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'\beta\downarrow} a_{\mathbf{k}\alpha\uparrow} \\ & + \frac{1}{N_L} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}, \sigma, \sigma', \alpha, \beta} V_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\alpha\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\beta\sigma'}^\dagger a_{\mathbf{k}'\beta\sigma'} a_{\mathbf{k}\alpha\sigma} \end{aligned} \quad (25)$$

ここで、

$$\begin{aligned} \epsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) &= \sum_{\delta} t_{\alpha\beta} e^{i\mathbf{k} \cdot \delta}, \\ U_{\alpha\beta} &= U_{\alpha} \delta_{\alpha\beta}, \\ V_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) &= \frac{1}{2} \sum_{\delta} V_{\alpha\beta} e^{-i\mathbf{q} \cdot \delta} \end{aligned} \quad (26)$$

である。 δ は最近接の単位格子を表わすベクトルである。 α -(BEDT-TTF) $_2\text{I}_3$ では、 $\epsilon_{\alpha\beta}$ は飛び移り積分 t_A を用いて

$$\begin{aligned} \epsilon_{12}(\mathbf{k}) &= t_{a2} + t_{a3} e^{-ik_y}, & \epsilon_{23}(\mathbf{k}) &= t_{b3} e^{ik_y} + t_{b2} e^{i(k_x + k_y)}, \\ \epsilon_{13}(\mathbf{k}) &= t_{b2} + t_{b3} e^{ik_x}, & \epsilon_{24}(\mathbf{k}) &= t_{b4} + t_{b2} e^{ik_x}, \\ \epsilon_{14}(\mathbf{k}) &= t_{b1} + t_{b4} e^{ik_x}, & \epsilon_{24}(\mathbf{k}) &= t_{a1} + t_{a1} e^{-ik_y}, \end{aligned}$$

と書ける。また、異方的な最近接斥力相互作用 $V_{\alpha\beta}$ は

$$\begin{aligned} V_{12}(\mathbf{q}) &= \frac{1}{2} (V_a + V_a e^{iq_y}), & V_{23}(\mathbf{q}) &= \frac{1}{2} (V_b e^{-iq_y} + V_b e^{-i(q_x + q_y)}), \\ V_{13}(\mathbf{q}) &= \frac{1}{2} (V_b + V_b e^{-iq_x}), & V_{24}(\mathbf{q}) &= \frac{1}{2} (V_b + V_b e^{-iq_x}), \\ V_{14}(\mathbf{q}) &= \frac{1}{2} (V_b + V_b e^{-iq_x}), & V_{24}(\mathbf{q}) &= \frac{1}{2} (V_a + V_a e^{iq_y}), \end{aligned}$$

と書ける。ただし、 $\epsilon_{\alpha\alpha} = 0$, $V_{\alpha\alpha} = 0$, $\epsilon_{\beta\alpha}^* = \epsilon_{\alpha\beta}$, $V_{\beta\alpha}^* = V_{\alpha\beta}$ である。

クーロン相互作用項については Hartree 近似を用いる。

$$\begin{aligned} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} &\rightarrow \langle n_{i\uparrow} \rangle n_{i\downarrow} + n_{i\uparrow} \langle n_{i\downarrow} \rangle - \langle n_{i\uparrow} \rangle \langle n_{i\downarrow} \rangle, \\ n_{i\sigma} n_{i\sigma'} &\rightarrow \langle n_{i\sigma} \rangle n_{i\sigma'} + n_{i\sigma} \langle n_{i\sigma'} \rangle - \langle n_{i\sigma} \rangle \langle n_{i\sigma'} \rangle. \end{aligned} \quad (27)$$

したがって、平均場ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H_{\text{MF}} &= \sum_{\mathbf{k}\alpha\beta\sigma} \tilde{\epsilon}_{\alpha\beta\sigma}(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}\alpha\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\beta\sigma} \\ &\quad - \sum_{\alpha} U_{\alpha} \langle n_{\alpha\uparrow} \rangle \langle n_{\alpha\downarrow} \rangle - \sum_{\langle\alpha,\beta\rangle,\sigma,\sigma'} V_{\alpha\beta} \langle n_{\alpha\sigma} \rangle \langle n_{\beta\sigma'} \rangle, \\ \tilde{\epsilon}_{\alpha\beta\sigma}(\mathbf{k}) &= \delta_{\alpha\beta} [U_{\alpha} \langle n_{\alpha\sigma} \rangle + \sum_{\beta'\sigma'} V_{\alpha\beta'} \langle n_{\beta'\sigma'} \rangle] + \epsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{k}), \\ \epsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) &= \sum_{\delta} t_{\alpha\beta} e^{i\mathbf{k}\cdot\delta} \end{aligned} \quad (28)$$

と書ける。ここで、 $n_{\alpha\sigma} = a_{i\alpha\sigma}^\dagger a_{i\alpha\sigma}$ 、 $\bar{\sigma} = -\sigma$ とおいた。また δ は単位格子の最近接を表わすベクトルである。(28) 式のハミルトニアンは対角化することができて、

$$\sum_{\beta=1}^4 \epsilon_{\alpha\beta\sigma}(\mathbf{k}) d_{\beta r\sigma}(\mathbf{k}) = \xi_{r\sigma}(\mathbf{k}) d_{\alpha r\sigma}(\mathbf{k}) \quad (29)$$

と書ける。 $r = 1, 2, 3, 4$ はそれぞれの固有状態を表わすインデックスである。 $\xi_{r\sigma}$ はその固有値であり、降順 $\xi_{1\sigma}(\mathbf{k}) > \xi_{2\sigma}(\mathbf{k}) > \xi_{3\sigma}(\mathbf{k}) > \xi_{4\sigma}(\mathbf{k})$ になるように定義した。また、 $d_{\alpha r\sigma}(\mathbf{k})$ はそれに対応する固有ベクトルである。 α サイトにおけるスピン σ を持つ電子の数 $\langle n_{\alpha\sigma} \rangle = (1/N) \sum_{i\sigma} \langle a_{i\alpha\sigma}^\dagger a_{i\alpha\sigma} \rangle$ は、

$$\langle n_{\alpha\sigma} \rangle = \sum_{r=1}^4 |d_{\alpha r\sigma}(\mathbf{k})|^2 \frac{1}{\exp[(\xi_{r\sigma}(\mathbf{k}) - \mu)/k_B T] + 1} \quad (30)$$

で与えられる。ここで、 T は温度を表わし、 k_B はボルツマン定数を表わす。(30) 式は $\langle n_{\alpha\sigma} \rangle$ に対する自己無撞着な方程式である。化学ポテンシャル μ は、各分子当りの電子数が $\frac{3}{4}$ であるため、

$$\frac{3}{2} = \frac{1}{4} \sum_{\alpha\sigma} \langle n_{\alpha\sigma} \rangle \quad (31)$$

の条件により決定される。

2.2 一般化ワイル方程式

a-軸方向に圧力を掛けたときのエネルギーバンド分散について考えよう。単位格子中には 4 個の分子が存在するため、エネルギーバンドも 4 つ存在する。4 つのバンドの $\frac{3}{4}$ が満たされているため、最も高いエネルギーを持つバンド $r = 1$ は、ほぼ空であり、2 番目に高いエネルギーを持つバンド $r = 2$ は、ほぼ電子が詰まっている。

$r = 1$ と $r = 2$ のバンドは $\mathbf{k} = \pm \mathbf{k}_0$ の 2 点において接触し、そのまわりで線形なバンド分散を持っている [10]。 $P_a = 4.5 \text{ kbar}$ で $U = 0.4$, $V_a = 0.17$, $V_b = 0.05$ のときのコンタクトポイントは $\mathbf{k}_0 = (0.740\pi, -0.346\pi)$ である。

バンドの充填率が $\frac{3}{4}$ であるため、コンタクトポイントはフェルミ面に位置する。このコンタクトポイントは結晶の対称性によって生じたものではないが、偶然このような縮退が起こることは Herring によって示されている [21]。また、このようなコンタクトポイントは a -軸方向に対する広い圧力下 $P_a > 4.3 \text{ kbar}$ で安定して存在している。

したがって、コンタクトポイント近傍におけるハミルトニアンは $\tilde{\mathbf{k}} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$ とおくと

$$\begin{aligned} H(\mathbf{k}) &= H(\mathbf{k}_0) + H'(\tilde{\mathbf{k}}), \\ H'(\tilde{\mathbf{k}}) &= \tilde{\mathbf{k}} \cdot \nabla H(\mathbf{k}_0) \end{aligned} \quad (32)$$

で与えられる。ここで、 $r = 3, 4$ のバンドの寄与は十分小さいため無視することができる。結果として H' は伝導バンド ($r = 1$) および価電子バンド ($r = 2$) に対する 2×2 の行列で表わせる。速度行列 $\mathbf{u}_{rr'}(\mathbf{k}) = (u_{rr'}^x(\mathbf{k}), u_{rr'}^y(\mathbf{k}))$ を次のように与える

$$u_{rr'}^\tau(\mathbf{k}) = \sum_{\alpha\beta} d_{\alpha r}^*(\mathbf{k}) d_{\beta r'}(\mathbf{k}) \frac{\partial \tilde{\epsilon}_{\alpha\beta}(\mathbf{k})}{\partial k_\tau} \quad (33)$$

ここで、 $\tau = x, y$ および $r, r' = 1, 2$ である。この $\mathbf{u}_{rr'}(\mathbf{k})$ を用いて、速度 $\mathbf{v}_\rho(\mathbf{k})$ を次のように定義する

$$\begin{aligned} v_x(\mathbf{k}) &= \text{Re } \mathbf{u}_{12}(\mathbf{k}), & v_z(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2}(\mathbf{u}_{11}(\mathbf{k}) - \mathbf{u}_{22}(\mathbf{k})), \\ v_y(\mathbf{k}) &= \text{Im } \mathbf{u}_{12}(\mathbf{k}), & v_0(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2}(\mathbf{u}_{11}(\mathbf{k}) + \mathbf{u}_{22}(\mathbf{k})). \end{aligned} \quad (34)$$

有効ハミルトニアン H_{eff} はこれを用いて

$$H_{\text{eff}}(\tilde{\mathbf{k}}) = \sum_{\rho=x,y,z,0} \tilde{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v}_\rho(\mathbf{k}'_0) \sigma_\rho \quad (35)$$

と書ける。ここで σ_i ($i = x, y, z$) はパウリ行列を表わし σ_0 は単位行列である。 $\mathbf{u}_{rr'}$ はコンタクトポイント \mathbf{k}_0 において特異な振舞いを示すので、 \mathbf{k}_0 から無限小だけずれた \mathbf{k}'_0 点を導入して、 $\mathbf{u}_{rr'}$ を求める。 $\mathbf{k}'_0 - \mathbf{k}_0$ の方向は任意に取れる。線形のエネルギー分散 ξ_{eff} は H_{eff} を対角化して

$$\xi_{\text{eff}}(\tilde{\mathbf{k}}) = \tilde{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v}_0(\mathbf{k}'_0) \pm \sqrt{\sum_{i=x,y,z} (\tilde{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v}_i(\mathbf{k}'_0))^2} \quad (36)$$

と求められる。ここで、 $\mathbf{v}_x = (v_F, 0)$, $\mathbf{v}_y = (0, v_F)$, $\mathbf{v}_z = \mathbf{v}_0 = \mathbf{0}$ とおくと (35) 式は質量ゼロのディラック粒子を記述するワイル方程式に帰着することがわかる。また (36) 式の右辺第一項はディラックコーンの傾きに関係している。(36) 式の右辺第二項において

$$\sum_{i=x,y,z} (\tilde{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v}_i(\mathbf{k}'_0))^2 = \sum_{\tau, \tau'=x,y} \tilde{k}_\tau \tilde{k}_{\tau'} Q^{\tau\tau'}(\mathbf{k}'_0) \quad (37)$$

と二次形式で書くことができる。ここで $Q^{\tau\tau'}(\mathbf{k}'_0) = 4 \sum_{i=x,y,z} v_i^\tau v_i^{\tau'}$ である。したがって v_i ($i = x, y, z$) はコーンを楕円形にする働きを持ち、コーンの傾きには寄与しないことがわかる。結晶の対称性より、もう一方のコンタクトポイント $-\mathbf{k}_0$ において、これらの値は $v_\mu(-\mathbf{k}_0 + \delta\mathbf{k}) = -v_\mu(\mathbf{k}_0 - \delta\mathbf{k})$ で与えられる。

コンタクトポイント \mathbf{k}_0 近傍における $u_{\tau\tau'}(\mathbf{k})$ の特異な振舞いは波動関数の持つヘリシティの性質によるものである。この性質については、2.3 節において、より簡略化した場合について議論する。 v_0 に対してはこの特異な振舞いは打ち消し合い、コンタクトポイント近傍においてほぼ一定の値を持つ。したがって、この値は $P_a = 4.5$ kbar のとき、 $v_0(\mathbf{k}_0) = (-8.21 \times 10^{-2}, -1.29 \times 10^{-2})$ (格子定数 $a = b = 1$ とし、eV 単位で表す。)

v_i ($i = x, y, z$) については、これらのベクトルの回転の性質によって理解される。 \mathbf{k} が \mathbf{k}_0 点の周りを時計回りに回転すると、 v_i も、やはり時計回りに回転し、楕円状の軌跡を描くことがわかる。 $Q^{\tau\tau'}(\mathbf{k}_0)$ において、 v_i の特異な振舞いは打ち消される。したがって、 $P_a = 4.5$ kbar のとき、 $Q^{xx}(\mathbf{k}_0) = 4.40 \times 10^{-2}$, $Q^{xy}(\mathbf{k}_0) = 1.15 \times 10^{-2}$, $Q^{yy}(\mathbf{k}_0) = 3.34 \times 10^{-2}$, である。この二次形式を対角化するため、 \tilde{k}_x, \tilde{k}_y を回転し、それぞれ \tilde{K}_x, \tilde{K}_y とすると

$$\sum_{\tau\tau'} \tilde{k}_\tau \tilde{k}_{\tau'} Q^{\tau\tau'}(\mathbf{k}'_0) = A_x^2 \tilde{K}_x^2 + A_y^2 \tilde{K}_y^2 \quad (38)$$

とかける。ここで、 \tilde{K}_x, \tilde{K}_y は楕円の主軸にとった。これらの値は $A_x = 0.227$, $A_y = 0.161$ であり、また軸の回転角は $\phi_0 = -32.5$ degree である。

2.3 簡略化された傾いたワイル方程式

(35) 式には 8 個のパラメータがあるが、対称性よりコンタクトポイント近傍の有効ハミルトニアンは、

$$\mathcal{H} = \tau v_0 \cdot \mathbf{q} \sigma^0 + v_x q_x \sigma^x + \tau v_y q_y \sigma^y \quad (39)$$

と書ける。ここで、 q_x, q_y が楕円の主軸の方向を向くように系を回転したため x, y 座標軸は結晶軸方向 a, b からずれる。結晶軸と座標軸が成す角を ϕ_0 とおく。

エネルギー分散は $E = v_0 \cdot \mathbf{q} \pm \sqrt{v_x^2 q_x^2 + v_y^2 q_y^2}$ となる。また、この傾いたワイル方程式におけるヘリシティ演算子は

$$\hat{h} = \frac{v_x q_x \sigma^x + v_y q_y \sigma^y}{\sqrt{v_x^2 q_x^2 + v_y^2 q_y^2}} \quad (40)$$

と書ける。この演算子はハミルトニアンと可換である。ヘリシティ演算子固有ベクトルは

$$\psi_s = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\varphi} \\ s \end{pmatrix}, \quad \text{ただし } \tan \varphi = \frac{v_y q_y}{v_x q_x} \quad (41)$$

で与えられる。 $s = +1, -1$ はそれぞれ伝導バンド、価電子バンドを表わす。これらの固有状態は一般化されたワイル方程式の固有状態である。

ここで、前述のコンタクトポイント近傍における速度行列 $u_{rr'}$ の特異な振舞いについて、簡略化された場合のハミルトニアンを用いて議論する。この傾いた場合のハミルトニアン (39) および固有ベクトル (41) に対して (33) 式より $u_{rr'}$ を求めると、

$$\begin{aligned} u_{11}^x(\mathbf{q}) &= v_0^x + v_x \cos \varphi, & u_{22}^x(\mathbf{q}) &= v_0^x - v_x \cos \varphi, \\ u_{11}^y(\mathbf{q}) &= v_0^y + v_y \sin \varphi, & u_{22}^y(\mathbf{q}) &= v_0^y - v_y \sin \varphi, \\ u_{21}^x(\mathbf{q}) &= i v_x \sin \varphi, & u_{21}^y(\mathbf{q}) &= -i v_x \cos \varphi \end{aligned}$$

である。これらは、前述の α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ の強束縛バンドモデルより求めた u と同様に、 v_0 に対しては一定の値を取り、 k を時計回りに回転させると v も時計回りに回転し、楕円状の軌跡を描くことがわかる。

このように、傾いたワイル方程式の固有状態はヘリシティの固有状態になり、 α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ の強束縛モデルにおいて現われた速度行列の特異な振舞いは、波動関数のヘリシティによるものと理解できる。

以上の議論より、 α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ における低エネルギー励起は、傾いたワイル方程式 (39) で良く記述されると考えられる。

3 傾いたディラックコーンにおけるランダウ準位波動関数

層間磁気抵抗を計算するためには、磁場下での電子の波動関数を調べる必要がある。傾いたディラックコーンにおいても、磁場中では傾きを持たない場合と同様に電子がランダウ準位に量子化される。この章では前章で導出された α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ 系の線形化されたハミルトニアンを用いてランダウ準位波動関数を計算する。

3.1 磁場下でのハミルトニアン

簡略化されたハミルトニアンは、磁場中では

$$\mathcal{H}_\tau = \tau v_0 \cdot \Pi \sigma_0 + v_x \Pi_x \sigma_x + \tau v_y \Pi_y \sigma_y \quad (42)$$

と書かれる。ここで、 Π_μ ($\mu = x, y$) は動的運動量 $\Pi_\mu = p_\mu - e A_\mu = -i\hbar \partial_\mu - e A_\mu$ であり、また σ_μ ($\mu = x, y, z$) はパウリ行列を表わし、 σ_0 は単位行列である。 $\tau = +1, -1$ はそれぞれ valley $k_0, -k_0$ を表す ($e < 0$)。 Π は磁気長を $l_z = \sqrt{\frac{\hbar}{|e|B_z}}$ とおくと

$$[\Pi_x, \Pi_y] = i\hbar e (\partial_x A_y - \partial_y A_x) = i\hbar e B_z = -i \frac{\hbar^2}{l_z^2} \quad (43)$$

であるから、 Π_x, Π_y は正準共役である。

古典論との対応から、座標 (x, y) をサイクロトロン円運動を表わす相対座標 (ξ, η) と中心の位置を表わす中心座標 (X, Y) を導入し、

$$(x, y) = (X, Y) + (\xi, \eta) \quad (44)$$

と表そう。相対座標 (ξ, η) は

$$(\xi, \eta) = \frac{l_z^2}{\hbar}(\Pi_y, -\Pi_x) \quad (45)$$

と表わせる。これを用いて回転中心の座標を表すと、

$$X = x - \frac{l_z^2}{\hbar}\Pi_y, \quad Y = y + \frac{l_z^2}{\hbar}\Pi_x \quad (46)$$

このとき X, Y と ξ, η は交換関係

$$\begin{aligned} [\xi, \eta] &= \frac{l_z^4}{\hbar^2}[\Pi_y, -\Pi_x] = -il_z^2, & [X, Y] &= il_z^2, \\ [\xi, X] &= [\xi, Y] = [\eta, X] = [\eta, Y] = 0 \end{aligned}$$

を満たす。

傾きに起因しないフェルミ速度の異方性を取り扱うため、生成・消滅演算子 \hat{a} を

$$\begin{aligned} \hat{a} &= \frac{l_z}{\sqrt{2}\hbar} \left(\sqrt{\frac{v_x}{v_y}}\Pi_x - i\sqrt{\frac{v_y}{v_x}}\Pi_y \right), \\ \hat{a}^\dagger &= \frac{l_z}{\sqrt{2}\hbar} \left(\sqrt{\frac{v_x}{v_y}}\Pi_x + i\sqrt{\frac{v_y}{v_x}}\Pi_y \right) \end{aligned} \quad (47)$$

とおくと、交換関係 $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ を満たす。

(47) 式の生成・消滅演算子を用いて、 Π_μ を表すと、

$$v_x\Pi_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}l_z}\sqrt{v_xv_y}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \quad v_y\Pi_y = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}l_z}\sqrt{v_xv_y}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \quad (48)$$

したがって、

$$\begin{aligned} v_0^x\Pi_x + v_0^y\Pi_y &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}l_z}\sqrt{v_xv_y} \left[\frac{v_0^x}{v_x}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) + i\frac{v_0^y}{v_y}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \right] \\ &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}l_z}\sqrt{v_xv_y} \left[\tilde{v}_0 e^{i\varphi} \hat{a} + \tilde{v}_0 e^{-i\varphi} \hat{a}^\dagger \right] \end{aligned} \quad (49)$$

ここで、

$$\tilde{v}_0 e^{i\varphi} \equiv \frac{v_0^x}{v_x} + i\frac{v_0^y}{v_y} \quad (50)$$

とおいた。 \tilde{v}_0 は傾きの大きさと関係するパラメータで、 φ は傾きの方向を表わすパラメータである。

このときハミルトニアンは、それぞれの valley において

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\mathbf{k}_0} &= \sqrt{2\hbar v_x v_y} |e| B_z \begin{pmatrix} \frac{\tilde{v}_0}{2}(e^{i\varphi}\hat{a} + e^{-i\varphi}\hat{a}^\dagger) & a \\ a^\dagger & \frac{\tilde{v}_0}{2}(e^{i\varphi}\hat{a} + e^{-i\varphi}\hat{a}^\dagger) \end{pmatrix}, \\ \mathcal{H}_{-\mathbf{k}_0} &= \sqrt{2\hbar v_x v_y} |e| B_z \begin{pmatrix} -\frac{\tilde{v}_0}{2}(e^{i\varphi}\hat{a} + e^{-i\varphi}\hat{a}^\dagger) & a^\dagger \\ a & -\frac{\tilde{v}_0}{2}(e^{i\varphi}\hat{a} + e^{-i\varphi}\hat{a}^\dagger) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (51)$$

と書ける。

このことから $\tilde{v}_0 = 0$ で傾きがない場合には通常のディラック電子のランダウ準位を求める問題に帰着できる。

解析的な波動関数を求める前に、傾きによってエネルギーの等値面がどのように変形するかを調べよう。エネルギー E と運動量 \mathbf{p} との関係式は

$$E = \mathbf{v}_0 \cdot \mathbf{p} \pm \sqrt{v_x^2 p_x^2 + v_y^2 p_y^2} \quad (52)$$

で与えられる。ここで次のような変換を考える。

$$\begin{pmatrix} v_x p'_x \\ v_y p'_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi \\ \sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_x p_x \\ v_y p_y \end{pmatrix} \quad (53)$$

これは傾きを持たない場合のフェルミ速度が等方的になるように変換を行なった後、系全体を xy 面内で角度 $-\varphi$ だけ回転する変換に相当する。したがってこの変換により、傾きの方向は x 軸方向になる。この変換の下で、

$$v_0^x p_x + v_0^y p_y \rightarrow \tilde{v}_0 v_x p'_x \quad (54)$$

と変換し、 $v_x^2 p_x^2 + v_y^2 p_y^2$ は、この変換の下で不変である。

したがって、エネルギー等値面は図 6 に示したように楕円形となり、

$$\gamma \left(v_x p'_x + \frac{E \tilde{v}_0}{1 - \tilde{v}_0^2} \right)^2 + \frac{1}{\gamma} v_y^2 p_y'^2 = \frac{E^2}{\gamma^3} \quad (55)$$

と書ける。ここで、

$$\gamma = \sqrt{1 - \tilde{v}_0^2} \quad (56)$$

とおいた。ディラックコーンの傾きは、エネルギー等値面を楕円形にする効果と、その中心をずらす効果をもたらすことがわかる。

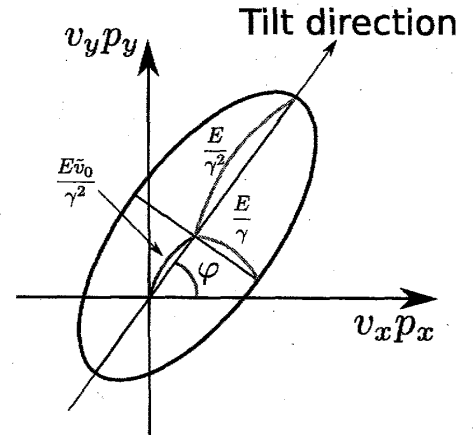


図 6: 傾いたディラックコーンにおけるエネルギー等値面

3.2 傾きがある場合の厳密解

3.1 節で導入した生成・消滅演算子 \hat{a}, \hat{a}^\dagger によって作られる数演算子 $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$ の固有状態は、異方性のみを持ち傾きを持たない場合にはハミルトニアンを対角化する基底を与える。しかし、この生成・消滅演算子には、図 6 のように、エネルギー等値面の中心が傾きの存在によってずれる効果が含まれていないため適切な基底を与えることができない。この節では傾きの効果を取り入れた生成・消滅演算子を導入し、傾いた場合の解を導出する。

(53) 式と同様に磁場中においても、動的運動量を

$$\begin{pmatrix} v_x \Pi_{x'} \\ v_y \Pi_{y'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi \\ \sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_x \Pi_x \\ v_y \Pi_y \end{pmatrix} \quad (57)$$

と変換する。この変換の下で、生成・消滅演算子は

$$\hat{a} \rightarrow \hat{a}' = e^{-i\varphi} \hat{a} \quad (58)$$

と変換される。したがって、ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{k_0} &= \sqrt{2\hbar v_x v_y |e| B_z} \begin{pmatrix} \frac{\tilde{v}_0}{2} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) & \hat{a} e^{-i\varphi} \\ \hat{a}^\dagger e^{i\varphi} & \frac{\tilde{v}_0}{2} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \end{pmatrix}, \\ \mathcal{H}_{-k_0} &= \sqrt{2\hbar v_x v_y |e| B_z} \begin{pmatrix} -\frac{\tilde{v}_0}{2} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) & \hat{a}^\dagger e^{i\varphi} \\ \hat{a} e^{-i\varphi} & -\frac{\tilde{v}_0}{2} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (59)$$

となる。

(57) 式による変換後、再び生成・消滅演算子 \hat{a} を

$$\hat{a} = \frac{l_z}{\sqrt{2\hbar}} \left(\sqrt{\frac{v_x}{v_y}} \Pi_x - i \sqrt{\frac{v_y}{v_x}} \Pi_y \right) \quad (60)$$

と取り直すと、交換関係 $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ を満たす。

(59) 式はグラフェンと異なり傾きに起因する対角成分が現われる。 k_0 点に着目し、シュレディンガー方程式 $\mathcal{H}\psi = E\psi$ の両辺からの対角成分を引くと、(59) より

$$\begin{pmatrix} 0 & a e^{-i\varphi} \\ a^\dagger e^{i\varphi} & 0 \end{pmatrix} \psi = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \varepsilon - \frac{\tilde{v}_0}{2} (a + a^\dagger) \right) \psi \quad (61)$$

となる。ここで簡単のため $E = \frac{\hbar}{l_z} \sqrt{v_x v_y} \varepsilon = \sqrt{\hbar v_x v_y |e| B_z} \varepsilon$ とおいた。両辺に

$$\begin{pmatrix} 0 & a e^{-i\varphi} \\ a^\dagger e^{i\varphi} & 0 \end{pmatrix} \quad (62)$$

を左から作用させると

$$\begin{pmatrix} a a^\dagger & 0 \\ 0 & a^\dagger a \end{pmatrix} \psi = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \varepsilon - \frac{\tilde{v}_0}{2} (a + a^\dagger) \right)^2 \psi + \frac{\tilde{v}_0}{2} \begin{pmatrix} 0 & -e^{-i\varphi} \\ e^{i\varphi} & 0 \end{pmatrix} \psi \quad (63)$$

(47) 式より、数演算子 $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$ は、動的運動量を用いて

$$\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a} = \frac{l_z^2}{2\hbar^2} \left(\frac{v_x}{v_y} \Pi_x^2 + \frac{v_y}{v_x} \Pi_y^2 \right) - \frac{1}{2} \quad (64)$$

と書けるので、これを (63) 式に代入すると、

$$\begin{aligned} & \frac{l_z^2}{2\hbar^2} \left(\frac{v_x}{v_y} \Pi_x^2 + \frac{v_y}{v_x} \Pi_y^2 \right) \psi + \frac{\tau}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \psi \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \varepsilon - \tau \frac{\tilde{v}_0}{2} \frac{\sqrt{2} l_z}{\hbar} \sqrt{\frac{v_x}{v_y}} \Pi_x \right)^2 \psi + \frac{\tilde{v}_0}{2} \begin{pmatrix} 0 & -e^{-i\varphi} \\ e^{i\varphi} & 0 \end{pmatrix} \psi \end{aligned} \quad (65)$$

これを展開して整理すると

$$\begin{aligned} \frac{l_z^2}{\hbar^2} \left[(1 - \tilde{v}_0^2) \left(\sqrt{\frac{v_x}{v_y}} \Pi_x + \frac{\tau}{\sqrt{v_x v_y}} \frac{E \tilde{v}_0}{1 - \tilde{v}_0^2} \right)^2 + \frac{v_y}{v_x} \Pi_y^2 \right] \psi \\ = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon^2}{1 - \tilde{v}_0^2} - \tau & -\tilde{v}_0 e^{-i\varphi} \\ \tilde{v}_0 e^{i\varphi} & \frac{\varepsilon^2}{1 - \tilde{v}_0^2} + \tau \end{pmatrix} \psi \end{aligned} \quad (66)$$

ここで、新しい動的運動量 $\tilde{\Pi}_x, \tilde{\Pi}_y$ を次のように導入する。

$$\tilde{\Pi}_x = \alpha \sqrt{\gamma} \left(\Pi_x + \frac{\tau}{v_x} \frac{E \tilde{v}_0}{\gamma^2} \right), \quad \tilde{\Pi}_y = \frac{1}{\alpha \sqrt{\gamma}} \Pi_y \quad (67)$$

ただし

$$\alpha = \sqrt{\frac{v_x}{v_y}}, \quad \gamma = \sqrt{1 - \tilde{v}_0^2} \quad (68)$$

とおいた。 $\tilde{\Pi}_x, \tilde{\Pi}_y$ は交換関係

$$[\tilde{\Pi}_x, \tilde{\Pi}_y] = -i \frac{\hbar^2}{l_z^2} \quad (69)$$

を満たし、これらを用いると、(63) 式は

$$\frac{l_z^2}{\hbar^2} [\tilde{\Pi}_x^2 + \tilde{\Pi}_y^2] \psi = \frac{1}{\gamma} \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon^2}{\gamma^2} - \tau & -\tilde{v}_0 e^{-i\varphi} \\ \tilde{v}_0 e^{i\varphi} & \frac{\varepsilon^2}{\gamma^2} + \tau \end{pmatrix} \psi \quad (70)$$

となる。ここで、(67), (70) 式を通常のディラック電子系における場合と比較することで、ディラックコーンの傾き \tilde{v}_0 は 2 つの効果を持つことが分かる。ひとつは、運動量 Π_x, Π_y をそれぞれ $\sqrt{\gamma}, \frac{1}{\sqrt{\gamma}}$ だけスケール変換する効果である。もうひとつは、波動関数の中心をエネルギー準位に比例してシフトする効果である。

(70) 式を満たす ψ を求めよう。(67) 式の動的運動量を用いた新しい消滅演算子

$$\begin{aligned} \tilde{a} &= \frac{l_z}{\sqrt{2}\hbar} (\tilde{\Pi}_x - i\tilde{\Pi}_y) \\ &= \frac{l_z}{\sqrt{2}\hbar} \left[\alpha \sqrt{\gamma} \left(\Pi_x + \frac{\tau}{v_x} \frac{E \tilde{v}_0}{\gamma^2} \right) - i \frac{1}{\alpha \sqrt{\gamma}} \Pi_y \right] \end{aligned} \quad (71)$$

を導入しよう。これは元の生成・消滅演算子 \hat{a}, \hat{a}^\dagger と同様の交換関係 $[\tilde{a}, \tilde{a}^\dagger] = 1$ を満たす。はじめに述べたように、元の生成・消滅演算子は異方性の効果のみが考慮されており、上述の傾きによるスケール変換と中心のシフトの効果を取り入れていないため、傾いた場合のランダウ準位を記述することが困難であった。一方、新しい生成・消滅演算子 $\tilde{a}, \tilde{a}^\dagger$ は上記の効果を取り入れたものになっているため、傾いたランダウ準位を適切に取り扱うことができる。

この新しい生成・消滅演算子を用いて、数演算子

$$\tilde{N} = \tilde{a}^\dagger \tilde{a} = \frac{l_z^2}{2\hbar^2} (\tilde{\Pi}_x^2 + \tilde{\Pi}_y^2) - \frac{1}{2} \quad (72)$$

を導入し、その固有状態 ϕ_n ($\tilde{N}\phi_n = n\phi_n$) を用いて ψ を $\psi = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \phi_n$ と表わす。これを (70) 式に代入し、整理すると

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\gamma} \left(\frac{\varepsilon^2}{\gamma^2} - \tau \right) - 2n - 1 & -\frac{1}{\gamma} \tilde{v}_0 e^{-i\varphi} \\ \frac{1}{\gamma} \tilde{v}_0 e^{i\varphi} & \frac{1}{\gamma} \left(\frac{\varepsilon^2}{\gamma^2} + \tau \right) - 2n - 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = 0 \quad (73)$$

となる。よって解を持つには左辺の行列式が 0 である。このことからエネルギー ε が

$$\varepsilon = \pm \sqrt{\gamma^3(2n+1 \pm 1)} \quad (74)$$

となる。 $\varepsilon = \pm \sqrt{2\gamma^3 n}$ のとき、

$$\begin{pmatrix} -\frac{\tau}{\gamma} - 1 & -\frac{1}{\gamma} \tilde{v}_0 e^{-i\varphi} \\ \frac{1}{\gamma} \tilde{v}_0 e^{i\varphi} & \frac{\tau}{\gamma} - 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = 0 \quad (75)$$

傾きのパラメータ \tilde{v}_0 が 0 のときに意味のある解は

$$\begin{aligned} \psi^{k_0} &= \frac{1}{\sqrt{2(1+\gamma)}} \begin{pmatrix} -\tilde{v}_0 e^{-i\varphi} \\ \gamma + 1 \end{pmatrix} \phi_n, \\ \psi^{-k_0} &= \frac{1}{\sqrt{2(1+\gamma)}} \begin{pmatrix} \gamma + 1 \\ \tilde{v}_0 e^{-i\varphi} \end{pmatrix} \phi_n \end{aligned} \quad (76)$$

$\varepsilon = \pm \sqrt{2\gamma^3(n+1)}$ のとき、

$$\begin{pmatrix} -\frac{\tau}{\gamma} + 1 & -\frac{1}{\gamma} \tilde{v}_0 e^{-i\varphi} \\ \frac{1}{\gamma} \tilde{v}_0 e^{i\varphi} & \frac{\tau}{\gamma} + 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = 0 \quad (77)$$

$$\begin{aligned} \psi^{k_0} &= \frac{1}{\sqrt{2(1+\gamma)}} \begin{pmatrix} 1 + \gamma \\ -\tilde{v}_0 e^{i\varphi} \end{pmatrix} \phi_n, \\ \psi^{-k_0} &= \frac{1}{\sqrt{2(1+\gamma)}} \begin{pmatrix} \tilde{v}_0 e^{i\varphi} \\ 1 + \gamma \end{pmatrix} \phi_n \end{aligned} \quad (78)$$

したがって、エネルギー固有値 $\varepsilon = \text{sgn}(n)\sqrt{2\gamma^3|n|}$ を持つ波動関数 ψ_n は、 $n \neq 0$ のとき (76), (78) 式の線形結合で書けて

$$\begin{aligned} \psi_n^{k_0} &= \frac{A_n}{\sqrt{2(1+\gamma)}} \begin{pmatrix} -\tilde{v}_0 e^{-i\varphi} \\ \gamma + 1 \end{pmatrix} \phi_{|n|} + \frac{B_n}{\sqrt{2(1+\gamma)}} \begin{pmatrix} 1 + \gamma \\ -\tilde{v}_0 e^{i\varphi} \end{pmatrix} \phi_{|n|-1}, \\ \psi_n^{-k_0} &= \frac{A_n}{\sqrt{2(1+\gamma)}} \begin{pmatrix} \gamma + 1 \\ \tilde{v}_0 e^{-i\varphi} \end{pmatrix} \phi_{|n|} + \frac{B_n}{\sqrt{2(1+\gamma)}} \begin{pmatrix} \tilde{v}_0 e^{i\varphi} \\ 1 + \gamma \end{pmatrix} \phi_{|n|-1} \end{aligned} \quad (79)$$

となる。

(79) 式が、 $\mathcal{H}\psi = E\psi$ を満たすように 係数 A_n, B_n を決定する。元の生成・消滅演算子 (47) に (67) を代入して、シフトされた生成・消滅演算子を用いて書くと

$$\begin{aligned} \hat{a} &= \frac{l_z}{\sqrt{2}\hbar} \left(\frac{1}{\sqrt{\gamma}} \tilde{\Pi}_x - \frac{\tau}{\sqrt{v_x v_y}} \frac{E \tilde{v}_0}{\gamma^2} - i\sqrt{\gamma} \tilde{\Pi}_y \right) \\ &= \frac{1}{2\sqrt{\gamma}} \left[(1+\gamma) \tilde{a} + (1-\gamma) \tilde{a}^\dagger \right] - \frac{\tau}{\sqrt{2}} \frac{\varepsilon \tilde{v}_0}{\gamma^2} \end{aligned} \quad (80)$$

よって、(59) より

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} \tau \tilde{v}_0 & (1 + \tau\gamma) e^{-i\tau\varphi} \\ (1 - \tau\gamma) e^{i\tau\varphi} & \tau \tilde{v}_0 \end{pmatrix} \tilde{a}\psi + \begin{pmatrix} \tau \tilde{v}_0 & (1 - \tau\gamma) e^{-i\tau\varphi} \\ (1 + \tau\gamma) e^{i\tau\varphi} & \tau \tilde{v}_0 \end{pmatrix} \tilde{a}^\dagger\psi \\ &= \frac{\sqrt{2}\gamma\varepsilon}{\gamma^2} \begin{pmatrix} \tau & \tilde{v}_0 e^{-i\tau\varphi} \\ \tilde{v}_0 e^{i\tau\varphi} & \tau \end{pmatrix} \psi \end{aligned} \quad (81)$$

これより、 $n \neq 0$ の場合の A_n, B_n に対する関係式

$$A_n e^{-i\varphi} \sqrt{|n|} = B_n \frac{\varepsilon \sqrt{\gamma}}{\sqrt{2}\gamma^2} \quad (82)$$

を得る。ここで $\varepsilon = \text{sgn}(n) \sqrt{2\gamma^3|n|}$

$$\text{sgn}(n) = \begin{cases} 1 & (n > 0) \\ 0 & (n = 0) \\ -1 & (n < 0) \end{cases} \quad (83)$$

なので $A_n e^{-i\varphi} = \text{sgn}(n) B_n$

$$A_n = \frac{e^{i\varphi}}{\sqrt{2}}, \quad B_n = \frac{1}{\sqrt{2}} \text{sgn}(n) \quad (84)$$

以上よりエネルギー

$$E_n = \text{sgn}(n) \sqrt{2\hbar v_x v_y |e| B_z \gamma^3 |n|} \quad (85)$$

を持つランダウ準位波動関数は、 $n \neq 0$ の場合

$$\begin{aligned} \psi_n^{k_0} &= \frac{1}{2\sqrt{1+\gamma}} \left[\begin{pmatrix} -\tilde{v}_0 \\ (\gamma+1)e^{i\varphi} \end{pmatrix} \phi_{|n|} + \text{sgn}(n) \begin{pmatrix} 1+\gamma \\ -\tilde{v}_0 e^{i\varphi} \end{pmatrix} \phi_{|n|-1} \right], \\ \psi_n^{-k_0} &= \frac{1}{2\sqrt{1+\gamma}} \left[\begin{pmatrix} -\tilde{v}_0 \\ (\gamma+1)e^{i\varphi} \end{pmatrix} \phi_{|n|} + \text{sgn}(n) \begin{pmatrix} -\tilde{v}_0 e^{i\varphi} \\ 1+\gamma \end{pmatrix} \phi_{|n|-1} \right] \end{aligned} \quad (86)$$

である。また、 $n = 0$ のゼロモードランダウ準位波動関数は

$$\psi_0^{k_0} = \frac{1}{\sqrt{2(1+\gamma)}} \begin{pmatrix} -\tilde{v}_0 e^{-i\varphi} \\ \gamma+1 \end{pmatrix} \phi_0, \quad (87)$$

$$\psi_0^{-k_0} = \frac{1}{\sqrt{2(1+\gamma)}} \begin{pmatrix} \gamma+1 \\ \tilde{v}_0 e^{-i\varphi} \end{pmatrix} \phi_0 \quad (88)$$

である。

ここで、傾き $\tilde{v}_0 = 0$ のときの波動関数は

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \text{sgn}(n) \phi_{|n|-1} \\ \phi_{|n|} \end{pmatrix} \quad (89)$$

となり、傾きの無い場合の波動関数に帰着する。

3.3 対称ゲージの場合

傾いたワイル方程式における面間磁気抵抗について考察する前に、傾いた場合の波動関数が、実空間表示でどのような形を持つかを調べることは有益であろう。

この場合対称ゲージ

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r}, \quad (90)$$

$$\mathbf{B} = (B_x, B_y, B_z) \quad (91)$$

を取るのが便利である。このとき動的運動量 Π_μ は

$$\Pi_x = -i\hbar\partial_x - \frac{1}{2}e(B_y z - B_z y), \quad (92)$$

$$\Pi_y = -i\hbar\partial_y - \frac{1}{2}e(B_z x - B_x z) \quad (93)$$

と書ける。ここでゲージ変換

$$\psi = \exp \left[-i \left(\frac{x}{l_y^2} - \frac{y}{l_x^2} \right) \frac{z}{2} \right] \psi' \quad (94)$$

によって、動的運動量中の面内磁場成分 B_x, B_y は消去することができ、

$$\Pi_x = -i\hbar\partial_x + \frac{1}{2}eB_z y, \quad \Pi_y = -i\hbar\partial_y - \frac{1}{2}eB_z x \quad (95)$$

となる。ここで、 $l_\mu = \sqrt{\frac{\hbar}{|e|B_\mu}}$ ($\mu = x, y$) とおいた。

ここで、(57) 式のように、座標系をリスケールした後回転する。これは座標 x, y について

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\frac{v_x}{v_y} \sin \varphi \\ \frac{v_y}{v_x} \sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} \quad (96)$$

のような変換を行なうことと等価である。

また、(67) 式の変換は、

$$\tilde{x} \rightarrow \frac{1}{\alpha\sqrt{\gamma}}x, \quad \tilde{y} \rightarrow \alpha\sqrt{\gamma} \left(y + \frac{\tau}{v_x} \frac{E\tilde{v}_0}{\gamma^2} \frac{2}{eB_z} \right) = \alpha\sqrt{\gamma}y - 2\tau\tilde{v}_0 l_z \sqrt{2n} \quad (97)$$

と等価である。したがって、 $\tilde{a}^\dagger \tilde{a} \phi_n = n \phi_n$ を満たす ϕ_n を求め、式 (97), (96) の変換を行なえば良い。

座標変換 (97) 後においても、傾きがない場合と同様にサイクロトロン円運動を表わす相対座標 $(\tilde{\xi}, \tilde{\eta})$ と中心の位置を表わす中心座標 (\tilde{X}, \tilde{Y}) を導入し、

$$(\tilde{x}, \tilde{y}) = (\tilde{X}, \tilde{Y}) + (\tilde{\xi}, \tilde{\eta}) \quad (98)$$

と表そう。相対座標 (ξ, η) は

$$(\tilde{\xi}, \tilde{\eta}) = \frac{l_z^2}{\hbar} (\tilde{\Pi}_y, -\tilde{\Pi}_x) \quad (99)$$

と表わせる。これを用いて回転中心の座標を表すと、

$$\begin{aligned}\tilde{X} &= \tilde{x} - \frac{l_z^2}{\hbar} \tilde{\Pi}_y = \frac{1}{\alpha\sqrt{\gamma}} X, \\ \tilde{Y} &= \tilde{y} + \frac{l_z^2}{\hbar} \tilde{\Pi}_x = \alpha\sqrt{\gamma} Y\end{aligned}\quad (100)$$

となり、このとき \tilde{X}, \tilde{Y} と $\tilde{\xi}, \tilde{\eta}$ は交換関係

$$\begin{aligned}[\tilde{\xi}, \tilde{\eta}] &= \frac{l_z^4}{\hbar^2} [\tilde{\Pi}_y, -\tilde{\Pi}_x] = -il_z^2, & [\tilde{X}, \tilde{Y}] &= il_z^2, \\ [\tilde{\xi}, \tilde{X}] &= [\tilde{\xi}, \tilde{Y}] = [\tilde{\eta}, \tilde{X}] = [\tilde{\eta}, \tilde{Y}] = 0\end{aligned}$$

を満たす。

固有状態としては互いに交換しない中心座標 \tilde{X}, \tilde{Y} について、どのように対角化するかを選ぶ任意性がある。ここでは $\tilde{X}^2 + \tilde{Y}^2$ を対角型にした場合の波動関数について求めよう。

ここで、

$$\tilde{b} = \frac{1}{\sqrt{2}l_z} (\tilde{X} + i\tilde{Y}) \quad (101)$$

と定義すると、これらは交換関係

$$[\tilde{a}, \tilde{a}^\dagger] = [\tilde{b}, \tilde{b}^\dagger] = 1, \quad [\tilde{a}, \tilde{b}] = [\tilde{a}, \tilde{b}^\dagger] = 0 \quad (102)$$

を満たす。回転中心の座標は

$$\tilde{X}^2 + \tilde{Y}^2 = \frac{l_z^4}{\hbar^2} (\tilde{\Pi}_x^2 + \tilde{\Pi}_y^2) - \frac{2l_z^2}{\hbar} \left(\frac{v_y}{v_x} \tilde{x}\tilde{p}_y - \frac{v_x}{v_y} \tilde{y}\tilde{p}_x \right) \quad (103)$$

$$= 2l_z^2 \left(\tilde{N} - \tilde{L}_z + \frac{1}{2} \right) \quad (104)$$

で与えられる。ここで、 \tilde{L}_z は z 軸のまわりで定義される擬似的な角運動量演算子であり、

$$\begin{aligned}\tilde{L}_z &= \frac{1}{\hbar} (\tilde{x}\tilde{p}_y - \tilde{y}\tilde{p}_x) \\ &= \hbar(\tilde{a}^\dagger\tilde{a} - \tilde{b}^\dagger\tilde{b})\end{aligned} \quad (105)$$

である。

したがって $\tilde{X}^2 + \tilde{Y}^2$ を対角化すると z 軸のまわりの擬似的な角運動量演算子 \tilde{L}_z について対角化したことになる。この擬似的な角運動量の固有値を $-m\hbar$ とする。十分に大きい有限の面積 πR^2 の系を考える場合、 $0 \leq \langle \tilde{X}^2 + \tilde{Y}^2 \rangle \leq R^2$ という制限が付く。磁束量子 $\varphi_0 \equiv \frac{\hbar}{|e|}$ を用いると、 $N_\phi \equiv \frac{R^2}{2l_z^2} = \frac{\pi R^2 B_z}{\varphi_0}$ は系を貫く全ての磁束を、磁束量子を単位として数えた本数を与える。よって、 n 番目のランダウ準位においては m は $-n \leq m \leq N_\phi - n - 1$ の条件を満たす整数である。したがって、ランダウ準位の縮退度は N_ϕ で与えられる。

以上から、 ϕ_n をケットベクトル $|n, m\rangle$ で表わせることがわかる。ここで $\tilde{N}|n, m\rangle = \tilde{a}^\dagger\tilde{a}|n, m\rangle = n|n, m\rangle$, $\tilde{b}^\dagger\tilde{b}|n, m\rangle = (n - m)|n, m\rangle$, ($m, n \geq 0$) である。

波動関数を求めるにあたり、簡単のため

$$\tilde{\chi} = \frac{\tilde{x} - i\tilde{y}}{l_z}, \quad \partial_{\tilde{\chi}} = l_z(\partial_{\tilde{x}} + i\partial_{\tilde{y}}) \quad (106)$$

とおくと、生成・消滅演算子 $\tilde{a}, \tilde{a}^\dagger$ および、 $\tilde{b}, \tilde{b}^\dagger$ は、 $\tilde{\chi}$ と $\partial_{\tilde{\chi}}$ を用いて

$$\tilde{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(-i\partial_{\tilde{\chi}^*} - i\frac{1}{2}\tilde{\chi}), \quad (107)$$

$$\tilde{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(-i\partial_{\tilde{\chi}} + i\frac{1}{2}\tilde{\chi}^*), \quad (108)$$

$$\tilde{b} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\partial_{\tilde{\chi}} + \frac{1}{2}\tilde{\chi}^*), \quad (109)$$

$$\tilde{b}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\partial_{\tilde{\chi}^*} + \frac{1}{2}\tilde{\chi}) \quad (110)$$

と書ける。

したがって、ケットベクトル $|0, 0\rangle$ に対する座標表示の $\phi_{0,0}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | 0, 0 \rangle$ は $a|0, 0\rangle = b|0, 0\rangle = 0$ を解くことによって求めることができ、

$$\phi_{0,0}(\tilde{\mathbf{r}}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}l_z} e^{-\frac{|\tilde{\mathbf{r}}|^2}{4}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}l_z} \exp\left(-\frac{\tilde{x}^2 + \tilde{y}^2}{4l_z^2}\right) \quad (111)$$

となる。また、他の準位については a, b を用いて

$$|n, m\rangle = \frac{(b^\dagger)^{m+n}}{\sqrt{(m+n)!}} \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0, 0\rangle \quad (112)$$

として得られる。波動関数の座標表示は、Laguerre の多項式

$$L_n^m(t) = \frac{1}{n!} e^{t-t^2} \frac{d^n}{dt^n} (e^{-t} t^{n+m}) \quad (113)$$

を用いて、

$$\phi_{n,m}(\tilde{\mathbf{r}}) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{2\pi}l_z} \sqrt{\frac{n!}{2^m(m+n)!}} \exp\left(-\frac{|\tilde{\mathbf{r}}|^2}{4}\right) \tilde{\chi}^m L_n^m\left(\frac{|\tilde{\mathbf{r}}|^2}{2}\right) \quad (114)$$

と書ける。

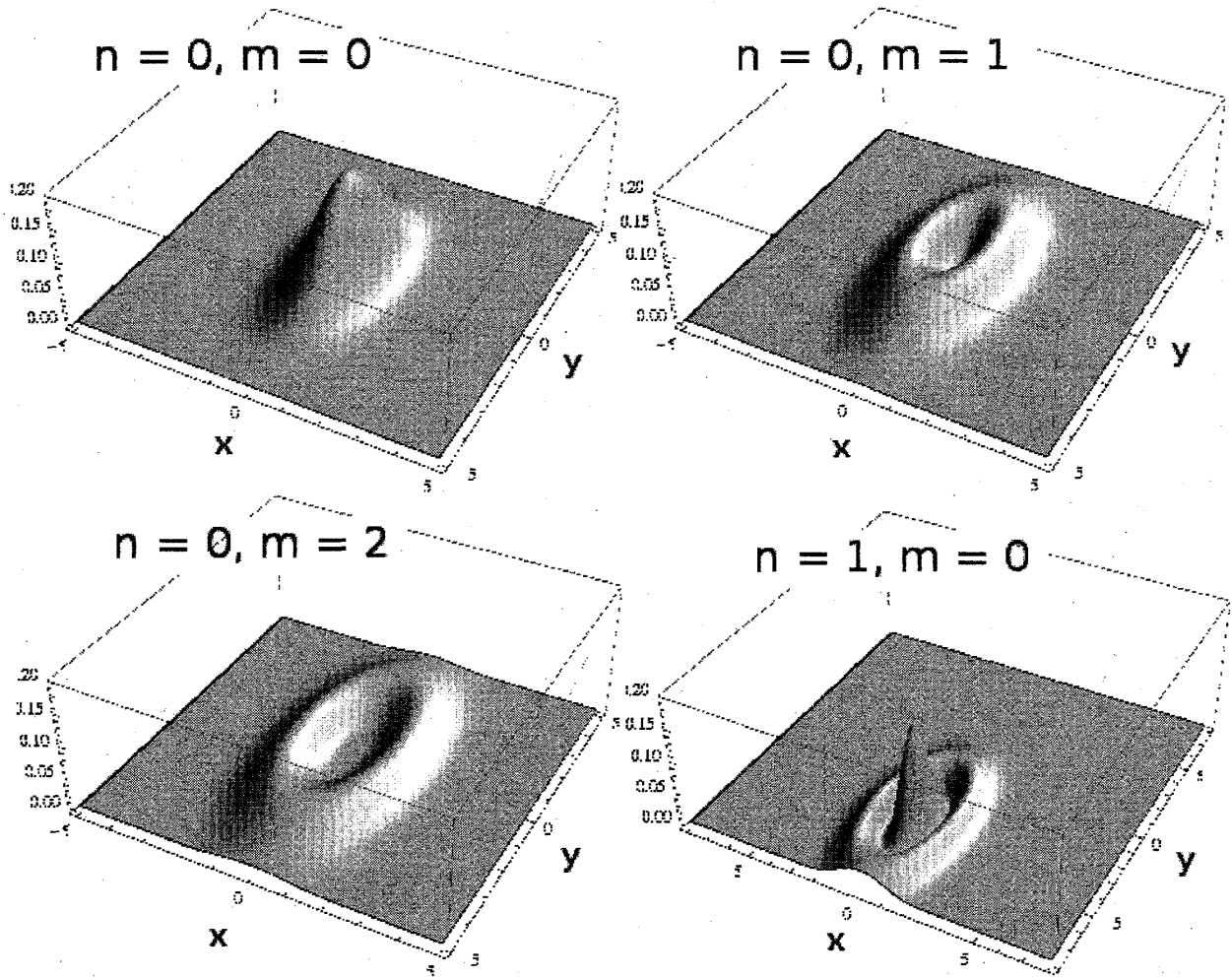
面間磁気抵抗の計算において、ゼロモードランダウ準位 $n = 0$ の波動関数が重要な役割をもつ。 $n = 0$ のとき

$$\phi_{0,m}(\tilde{\mathbf{r}}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi 2^m m!} l_z} \tilde{\chi}^m \exp\left(-\frac{|\tilde{\mathbf{r}}|^2}{4}\right) \quad (115)$$

となる。存在確率 $|\phi_{0,m}(\tilde{\mathbf{r}})|^2$ が最大となるのは $\sqrt{\tilde{x}^2 + \tilde{y}^2} = \sqrt{2m}l_z$ を満たす円周上であり、また $\langle 0, m | \tilde{x}^2 + \tilde{y}^2 | 0, m \rangle = 2(m+1)l_z^2$ である。

図 7 のように、 $n = 0$ のランダウ準位波動関数は傾きがない場合の波動関数と同じく局在しているが、その形は円ではなく楕円型につぶれていることがわかる。つまりディラックコーンが k_x 方向に大きく傾いている場合、存在確率の広がり、 x 軸方向には $\sqrt{\gamma}$ だけ狭まり、 y 軸方向には $\frac{1}{\sqrt{\gamma}}$ だけ広がっていることがわかる。

また、(97) 式および、図 7 より高次のランダウ準位に対してディラックコーンの傾きが及ぼす効果は、存在確率の歪む効果に加えて、存在確率の中心が y 軸方向に $-2\alpha^{-1}\tilde{v}_0 l_z$ だけ移動する働きを持つことがわかる。


 図 7: 対称ゲージでの $|\phi_{n,m}(\vec{r})|^2$

3.4 ランダウゲージの場合

面間磁気抵抗の計算をするにあたり、3.3 節で述べた対称ゲージよりもランダウゲージをとって求めた波動関数のほうが計算が容易である。この節では同様の計算を対称ゲージの代わりにランダウゲージをとって行なう。

ベクトルポテンシャルを

$$A_x = B_y z + A_x^{(z)}, \quad A_y = -B_x z + A_y^{(z)}, \quad A_z = 0, \quad \partial_x A_y^{(z)} - \partial_y A_x^{(z)} = B_z \quad (116)$$

と取ると、動的運動量 Π_μ は

$$\Pi_x = -i\hbar\partial_x - e(B_y z + A_x^{(z)}), \quad (117)$$

$$\Pi_y = -i\hbar\partial_y - e(-B_x z + A_y^{(z)}) \quad (118)$$

となる。ここで面内磁場成分 B_x, B_y を、ゲージ変換

$$\psi = \exp \left[-iz \left(\frac{x}{l_y^2} - \frac{y}{l_x^2} \right) \right] \psi' \quad (119)$$

を行なうことで消去する。したがって、

$$\psi'^{\dagger}\Pi_x\psi = \psi'^{\dagger}(-i\hbar\partial_x - eA_x^{(z)})\psi', \quad \psi'^{\dagger}\Pi_y\psi = \psi'^{\dagger}(-i\hbar\partial_y - eA_y^{(z)})\psi' \quad (120)$$

となる。

前節と同様に、スケール変換を行なった後、回転する。この変換後、 $A_{\mu}^{(z)}$ を

$$A_x^{(z)} = -B_z y, \quad A_y^{(z)} = 0 \quad (121)$$

と取ると、動的運動量は

$$\Pi_x = -i\hbar\partial_x + eB_z y, \quad \Pi_y = -i\hbar\partial_y \quad (122)$$

したがって、(67) の変換は、

$$\tilde{x} \rightarrow \frac{1}{\alpha\sqrt{\gamma}}x, \quad \tilde{y} \rightarrow \alpha\sqrt{\gamma}\left(y + \frac{\tau}{v_x}\frac{E\tilde{v}_0}{\gamma^2}\frac{1}{eB_z}\right) = \alpha\sqrt{\gamma}y - \tau\tilde{v}_0 l_z \sqrt{2n} \quad (123)$$

とすれば良い。したがって、変換された運動量 $\tilde{\Pi}_{\mu}$ は

$$\tilde{\Pi}_x = \alpha\sqrt{\gamma}\left(-i\hbar\partial_x + eB_z y + \frac{1}{v_x}\frac{E\tilde{v}_0}{\gamma^2}\right), \quad \tilde{\Pi}_y = -i\hbar\frac{1}{\alpha\sqrt{\gamma}}\partial_y \quad (124)$$

と書ける。また生成・消滅演算子 $\tilde{a}, \tilde{a}^{\dagger}$ は、

$$\begin{aligned} \tilde{a} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\alpha\sqrt{\gamma}\left(-il_z\partial_x - \frac{y}{l_z}\right) + \sqrt{2n}\tilde{v}_0 - \frac{1}{\alpha\sqrt{\gamma}}l_z\partial_y\right], \\ \tilde{a}^{\dagger} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\alpha\sqrt{\gamma}\left(-il_z\partial_x - \frac{y}{l_z}\right) + \sqrt{2n}\tilde{v}_0 + \frac{1}{\alpha\sqrt{\gamma}}l_z\partial_y\right] \end{aligned} \quad (125)$$

と書ける。 $\tilde{a}^{\dagger}\tilde{a}\phi_n = n\phi_n$ を満たす ϕ_n を求めれば解が得られる。

サイクロトロン円運動を表わす相対座標 $(\tilde{\xi}, \tilde{\eta})$ と中心の位置を表わす中心座標 (\tilde{X}, \tilde{Y}) を導入する。このゲージの下での回転中心の座標は、

$$\begin{aligned} \tilde{X} &= \tilde{x} - \frac{l_z^2}{\hbar}\tilde{\Pi}_y = \frac{1}{\alpha\sqrt{\gamma}}X, \\ \tilde{Y} &= \tilde{y} + \frac{l_z^2}{\hbar}\tilde{\Pi}_x = \alpha\sqrt{\gamma}Y \end{aligned} \quad (126)$$

と表わすことができる。

中心座標 \tilde{Y} を対角化した場合の波動関数を求める。 $\tilde{Y} = l_z^2\tilde{p}_x/\hbar = l_z^2\tilde{k}_x$ であるから \tilde{x} 方向の運動量は保存量である。したがって、 \tilde{x} 方向の波動関数は平面波

$$\phi(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{L_x}}\phi(y, z)\exp\left(\frac{i\tilde{Y}\tilde{x}}{l_z^2}\right) = \frac{1}{\sqrt{L_x}}\phi(y, z)e^{i\tilde{k}\tilde{x}} = \frac{1}{\sqrt{L_x}}\phi(y, z)e^{ikx} \quad (127)$$

で与えられる。ここで L_x は x 方向の系の大きさである。

また、相対座標

$$\tilde{\eta} = \tilde{y} - \tilde{Y} = \alpha\sqrt{\gamma}(y - l_z^2 k) - \sqrt{2n}\tilde{v}_0 l_z \quad (128)$$

を用いて生成・消滅演算子を書きなおすと

$$\tilde{a} = -\frac{1}{\sqrt{2}l_z}(\tilde{\eta} + l_z^2\tilde{\partial}_\eta), \quad (129)$$

$$\tilde{a}^\dagger = -\frac{1}{\sqrt{2}l_z}(\tilde{\eta} - l_z^2\tilde{\partial}_\eta) \quad (130)$$

となる。したがって ϕ_0 は

$$\tilde{a}\phi_0(\tilde{\eta}) = -\frac{1}{\sqrt{2}l_z}(\tilde{\eta} + l_z^2\tilde{\partial}_\eta)\phi_0(\tilde{\eta}) = 0 \quad (131)$$

を解くことで求める。規格化条件より

$$\phi_0(\tilde{\eta}) = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}\sqrt{l_z}} \exp\left(-\frac{\tilde{\eta}^2}{2l_z^2}\right) \quad (132)$$

となることがわかる。

また、 n 次のランダウ準位波動関数は

$$\phi_n(\tilde{\eta}) = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\tilde{a}^\dagger)^n\phi_0(\tilde{\eta}) \quad (133)$$

$$= \frac{(-1)^n}{\pi^{\frac{1}{4}}\sqrt{2^n n!}l_z} \frac{1}{l_z^n}(\tilde{\eta} - l_z\tilde{\partial}_\eta)^n e^{-\frac{\tilde{\eta}^2}{2l_z^2}} = \frac{(-1)^n}{\pi^{\frac{1}{4}}\sqrt{2^n n!}l_z} e^{-\frac{\tilde{\eta}^2}{2l_z^2}} H_n\left(\frac{\tilde{\eta}}{l_z}\right) \quad (134)$$

$$= \frac{(-1)^n}{\pi^{\frac{1}{4}}\sqrt{2^n n!}l_z} \exp\left[-\frac{(\tilde{y} - \tilde{Y})^2}{2l_z^2}\right] H_n\left(\frac{\tilde{y} - \tilde{Y}}{l_z}\right) \quad (135)$$

ここで、 $H_n(\eta)$ は Hermite 多項式

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \quad (136)$$

である。

十分に大きい有限な面積 $L_x \times L_y$ の系を考える。 x 方向には周期境界条件を取る、つまり $\phi(x + L_x, y, z) = \phi(x, y, z)$ とすると、これは (127) 式より $\exp\left(\frac{iY L_x}{l_z^2}\right) = 1$ であるので、 Y は $\frac{2\pi l_z^2}{L_x}$ の整数倍になる。したがって、 X についての和を積分に置きかえると、

$$\sum_X (\dots) = \frac{L_x}{2\pi l_z^2} \int_0^{L_x} (\dots) dX \quad (137)$$

したがって、各々のランダウ準位は中心座標の位置に関して $L_x L_y / 2\pi l_z^2$ だけ縮退することがわかる。つまり面積 $2\pi l_z^2$ あたり電子状態が 1 つ存在すると言えることができる。

このことから 1 つの電子状態あたりの磁束は $2\pi l_z^2 B_z = \frac{h}{|e|}$ であり、これは量子磁束である。したがって、各ランダウ準位において、1 電子状態は量子磁束 1 本あたり 1 つあることを示している。

4 傾いたディラックコーンにおける面間磁気抵抗

磁場中における層間伝導は、各々の層において電子がランダウ量子化され、隣り合う層同士でそれらがホッピングする描像で記述することができる。この章では久保公式を用いて、3.4 節で求めたランダウ準位波動関数より傾いたディラックコーンを持つ層状の擬二次元電子系における面間磁気抵抗の計算を行なう。

不純物散乱に関しては、各々のランダウ準位において、ある定数の緩和時間 τ を仮定する。したがって、その状態密度はデルタ関数型から、半値幅 $\Gamma \equiv 2\hbar/\tau$ を持つローレンツ型に変化する。一方で、自己無撞着ボルン近似による解析 [22] によると、状態密度は半楕円形になり、その幅は磁場依存性を持つ。しかし、ここでは簡単のため Γ の磁場依存性を無視することにする。

1.1.3 節で述べたように、 α -(BEDT-TTF)₂I₃ は 4 つあるバンドのうち 3 つまでに電子が詰まっており、フェルミ面は必ずバンド接点に位置する。

ゼロモードとその他のランダウ準位のエネルギー間隔が Γ よりも広い場合には、ゼロモードとその他のランダウ準位の状態密度の重なりが消失するため、面間磁気抵抗に対するゼロモード以外のランダウ準位間の遷移の寄与が絶対零度で消失する。

一方で傾きを持つ場合の $n=0$ と $n=1$ のランダウ準位間の幅は (85) 式より、 $\sqrt{2\hbar v_x v_y |e| B_z \gamma^3}$ で与えられる。傾きの大きさ \tilde{v}_0 が大きくなるにつれ $\gamma = \sqrt{1 - \tilde{v}_0^2}$ は小さくなるため、傾きの効果によってランダウ準位の幅は狭まることがわかる。

強磁場の場合を考え、ここでは特にゼロモードにおける効果を考える。

4.1 久保公式

久保公式によれば、伝導率テンソル $\sigma_{\mu\nu}(\omega)$ はカレントオペレータ J_μ を用いて

$$\sigma_{\mu\nu}(\omega) = -\frac{1}{i\omega} [Q_{\mu\nu}^R(\omega) - Q_{\mu\nu}^R(0)] \quad (138)$$

とあらわされる。ここで、 $Q_{\mu\nu}^R(\omega)$ は次式で与えられる相関関数のフーリエ成分である。

$$Q_{\mu\nu}^R(t) = \frac{1}{i\hbar V} \theta(t) \langle [J_\mu(t), J_\nu(0)] \rangle \quad (139)$$

ここで、 $\theta(t)$ は階段関数

$$\theta(t) = \begin{cases} 0, & t < 0 \\ 1, & t > 0 \end{cases} \quad (140)$$

を表わす。温度 Green 関数およびその Fourier 変換

$$Q_{\mu\nu}(\tau) = -\frac{1}{V} \langle T_\tau J_\mu(\tau) J_\nu(0) \rangle, \quad (141)$$

$$Q_{\mu\nu}(i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} Q_{\mu\nu}(\tau), \quad (142)$$

を考え、 $Q_{\mu\nu}(i\omega_n)$ を解析接続すれば $Q_{\mu\nu}^R(\omega)$ は

$$Q_{\mu\nu}^R(\omega) = Q_{\mu\nu}(\hbar\omega + i\delta) \quad (143)$$

と書ける。ここで、 δ は正の無限小である。

ここで、温度 Green 関数は J_μ を用いると

$$\begin{aligned} Q_{\mu\nu}(\tau) &= -\frac{1}{V} \langle T_\tau J_\mu(\tau) J_\nu(0) \rangle \\ &= -\frac{1}{ZV} \text{Tr}[e^{-\beta H} e^{\tau H} J_\mu e^{-\tau H} J_\nu] \\ &= -\frac{1}{ZV} \sum_{m,n} e^{-\beta E_\alpha} e^{\tau(E_\alpha - E_\beta)} \langle \alpha | J_\mu | \beta \rangle \langle \beta | J_\nu | \alpha \rangle \end{aligned} \quad (144)$$

と書けるので、

$$\begin{aligned} Q_{\mu\nu}(i\omega_n) &= -\frac{1}{ZV} \sum_{m,n} e^{-\beta E_n} \langle n | J_\mu | m \rangle \langle m | J_\nu | n \rangle \int_0^\beta d\tau e^{[i\omega_n + (E_n - E_m)]\tau} \\ &= -\frac{1}{ZV} \sum_{m,n} e^{-\beta E_n} \langle n | J_\mu | m \rangle \langle m | J_\nu | n \rangle \frac{e^{\beta(E_n - E_m)} - 1}{i\omega_n + (E_n - E_m)} \end{aligned} \quad (145)$$

したがって $Q_{\mu\nu}^R$ は

$$Q_{\mu\nu}^R(\omega) = -\frac{1}{ZV} \sum_{m,n} \langle n | J_\mu | m \rangle \langle m | J_\nu | n \rangle \frac{e^{-\beta E_m} - e^{-\beta E_n}}{\hbar\omega + i\delta + (E_n - E_m)} \quad (146)$$

以上より、伝導率テンソル $\sigma_{\mu\nu}(\omega)$ は

$$\sigma_{\mu\nu}(\omega) = \frac{i\hbar}{V} \sum_{m,n} \left[-\frac{f(E_m) - f(E_n)}{E_m - E_n} \right] \frac{\langle n | J_\mu | m \rangle \langle m | J_\nu | n \rangle}{\hbar\omega + i\delta + (E_n - E_m)} \quad (147)$$

とあらわされる。

4.2 z 軸方向の電流密度演算子

まず、面間のホッピングハミルトニアン H_c 、およびカレントオペレータ J_z を考える。タイトバインディング模型

$$H_c = -t_c \sum_{j,j_z} (c_{j,j_z}^\dagger c_{j,j_z+1} + c_{j,j_z+1} c_{j,j_z}^\dagger) = -2t_c \sum_{j,k_z} c_{j,k_z}^\dagger c_{j,k_z} \cos a_c k_z \quad (148)$$

について考える。ここで、 a_c は面の間隔、 t_c は面間の飛び移りエネルギーを表わす。 $k_z \rightarrow -i\partial_z - eA_z$ によりベクトルポテンシャルを含めると、カレントオペレータ J_z は次式で与えられる。

$$\begin{aligned} J_z &= e \frac{\partial H_c}{\partial k_z} = 2et_c \sum_{j,k_z} c_{j,k_z}^\dagger c_{j,k_z} \sin a_c k_z \\ &= iet_c \sum_{j,j_z} (c_{j,j_z+1}^\dagger c_{j,j_z} - c_{j,j_z}^\dagger c_{j,j_z+1}) \end{aligned} \quad (149)$$

電気伝導度を計算するには、Landau ゲージを用いるのが便利である。3.4 節で述べたように、このゲージの下では中心座標 X が保存量となるので、場の演算子 $\hat{\psi}$ は

$$\hat{\psi}(x, y, j_z) = \sum_{n, X} \psi_{n, X}(x, y, j_z) \hat{c}_{X, j_z} \quad (150)$$

で与えられる。これを用いると、 c 軸方向のカレントオペレータ J_z は

$$J_z = iet_c \int dx \int dy \sum_{j_z} [\hat{\psi}^\dagger(x, y, j_z) \hat{\psi}(x, y, j_z + 1) - h.c.] \quad (151)$$

$$= iet_c \int dx \int dy \sum_{j_z} \left[\sum_{n, n', X, X'} \psi_{n, X}^\dagger \psi_{n', X'} \hat{c}_{X, j_z}^\dagger \hat{c}_{X', j_z + 1} - h.c. \right] \quad (152)$$

と書ける。

ランダウ準位波動関数は、(119) (127) 式より、

$$\begin{aligned} \psi_{n, X}(x, y, z) &= \frac{1}{\sqrt{L_x}} \exp \left[-iz \left(\frac{x \cos \phi - y \alpha^2 \sin \phi}{l_y^2} - \frac{x \alpha^{-2} \sin \phi + y \cos \phi}{l_x^2} \right) \right] \\ &\times \psi'_{n, X}(y, z) e^{i\tilde{k}\tilde{x}} \end{aligned} \quad (153)$$

となる。系をスケール変換した後回転したことに注意しよう。ここで、図 8 のように磁場を定義する。

$$\mathbf{B} = B(\cos \theta \cos \phi, \cos \theta \sin \phi, \sin \theta) \quad (154)$$

このとき、ランダウ準位波動関数は

$$\begin{aligned} \psi_{n, X}(x, y, z) &= \frac{1}{\sqrt{L_x}} \exp [izK(x, y, \theta, \phi, \varphi)] \\ &\times \psi'_{n, X}(y, z) e^{i\tilde{k}\tilde{x}} \end{aligned} \quad (155)$$

である。ただし

$$\begin{aligned} K(x, y, \theta, \phi, \varphi) &= \\ &\frac{e}{\hbar} B \cos \theta \left\{ x(\sin \phi \cos \varphi - \alpha^{-2} \cos \phi \sin \varphi) \right. \\ &\quad \left. - y(\alpha^2 \sin \phi \sin \varphi + \cos \phi \cos \varphi) \right\} \end{aligned} \quad (156)$$

とおいた。

これを用いるとカレントオペレータ J_z は、

$$\begin{aligned} J_z &= iet_c \frac{1}{L_x} \int dx \int dy \sum_{n, n', k, k'} \left[e^{i(\tilde{k} - \tilde{k}')\tilde{y}} e^{ia_c K(x, y, \theta, \phi, \varphi)} \right. \\ &\quad \left. \times \psi_{n', k'}^\dagger \psi_{n, k} \hat{c}_{n, k, j_z}^\dagger \hat{c}_{n', k', j_z + 1} + h.c. \right] \end{aligned} \quad (157)$$

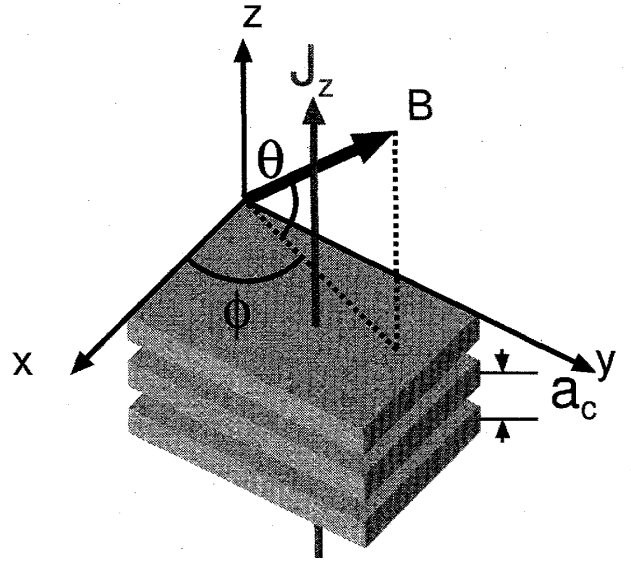


図 8: 磁場の方向の定義

である。ここで x 積分を実行すると、 k, k' を含む δ 関数になり、 k' が次の条件

$$k' = k + \frac{eB}{\hbar} \cos \theta (\sin \phi \cos \varphi - \alpha^{-2} \cos \phi \sin \varphi) a_c \quad (158)$$

を満たすときのみ J_z に寄与する。したがって、中心座標 \tilde{Y}' は

$$\tilde{Y}' = \tilde{Y} + l_z^2 \alpha \sqrt{\gamma} \delta k = \tilde{Y} + \alpha \sqrt{\gamma} \frac{\cos \theta}{\sin \theta} [\sin \phi \cos \varphi - \alpha^{-2} \cos \phi \sin \varphi] a_c \quad (159)$$

である。ここで、 $\delta k = \frac{eB}{\hbar} \cos \theta (\sin \phi \cos \varphi - \alpha^{-2} \cos \phi \sin \varphi) a_c$ とおいた。したがって J_z は

$$J_z = \frac{1}{L_x} \sum_{n, n', k, j_z} \left[\int dy \exp \left\{ -i a_c \frac{e}{\hbar} B \cos \theta (\alpha^2 \sin \phi \sin \varphi + \cos \phi \cos \varphi) y \right\} \right. \\ \left. \times \psi_{n', k + \delta k}^\dagger \psi_{n, k} \hat{c}_{n, k, j_z}^\dagger \hat{c}_{n', k + \delta k, j_z + 1} + h.c. \right] \quad (160)$$

となる。

したがって、その行列要素 $\langle n, k, j_z | J_z | n', Y', j'_z \rangle$ は

$$\langle n, Y, j_z | J_z | n', Y', j'_z \rangle \\ = i e t_c (\delta_{j+1, j'} - \delta_{j-1, j'}) \delta_{\tilde{Y}', \tilde{Y} + l_z^2 \delta k} \\ \times \int dy \exp \left\{ -i a_c \frac{e}{\hbar} B \cos \theta (\alpha^2 \sin \phi \sin \varphi + \cos \phi \cos \varphi) y \right\} \\ \times \psi_{n'}^\dagger \left(\frac{\alpha \sqrt{\gamma}}{l_z} y - \tilde{v}_0 \sqrt{2n'} \right) \psi_n \left(\frac{\alpha \sqrt{\gamma}}{l_z} (y - l_z^2 \delta k) - \tilde{v}_0 l_z \sqrt{2n} \right) \quad (161)$$

久保公式 (147) より面間磁気伝導率 σ_{zz} は

$$\sigma_{zz}(\omega) = \frac{i}{\hbar} \sum_{\text{spin}} \sum_{n, k, j, n', k', j'} \left[-\frac{f(E_{n'}) - f(E_n)}{E_{n'} - E_n} \right] \frac{|\langle n, k, j | J_z | n', k', j' \rangle|^2}{\hbar \omega + i\delta + (E_n - E_{n'})} \\ = 2 \frac{i e^2 t^2}{\hbar} \sum_{n, k, j, n'} \left[-\frac{f(E_{n'}) - f(E_n)}{E_{n'} - E_n} \right] \frac{1}{\hbar \omega + i\delta + (E_n - E_{n'})} \\ \times \left| \int dy \exp \left\{ -i a_c \frac{e}{\hbar} B \cos \theta (\alpha^2 \sin \phi \sin \varphi + \cos \phi \cos \varphi) y \right\} \right. \\ \left. \times \psi_{n'}^\dagger \left(\frac{\alpha \sqrt{\gamma}}{l_z} y - \tilde{v}_0 \sqrt{2n'} \right) \psi_n \left(\frac{\alpha \sqrt{\gamma}}{l_z} (y - l_z^2 \delta k) - \tilde{v}_0 l_z \sqrt{2n} \right) \right|^2 \quad (162)$$

で与えられる。ここで、 j, k に対する和は実行できて、それぞれ伝導層の数 N_{layer} 、ランダウ準位の縮退度 $\frac{1}{2\pi l_z^2} = \frac{|e| B_z}{2\pi \hbar}$ を与える。したがって

$$\sigma_{zz}(\omega) = \frac{i |e|^3 t^2}{\pi \hbar^2} N_{\text{layer}} B_z \sum_{n, n'} \left[-\frac{f(E_{n'}) - f(E_n)}{E_{n'} - E_n} \right] \frac{1}{\hbar \omega + i\delta + (E_n - E_{n'})} \\ \times \left| \int dy \exp \left\{ -i a_c \frac{e}{\hbar} B \cos \theta (\alpha^2 \sin \phi \sin \varphi + \cos \phi \cos \varphi) y \right\} \right. \\ \left. \times \psi_{n'}^\dagger \left(\frac{\alpha \sqrt{\gamma}}{l_z} y - \tilde{v}_0 \sqrt{2n'} \right) \psi_n \left(\frac{\alpha \sqrt{\gamma}}{l_z} (y - l_z^2 \delta k) - \tilde{v}_0 l_z \sqrt{2n} \right) \right|^2 \quad (163)$$

4.3 ゼロモード内の遷移の効果

ランダウ準位間隔が十分離れていると仮定していること、および化学ポテンシャルがエネルギーゼロにあることから、層間磁気抵抗において主要な寄与を与えると考えられるのはゼロモード間のホッピングである。ここでは 3 章で求めた厳密解を用いてゼロモードランダウ準位間の遷移が層間磁気抵抗に与える効果を解析的に調べる。

3.4 節より、ゼロモードランダウ準位波動関数は、ランダウゲージを用いると

$$\begin{aligned}\psi_0^{k_0} &= \frac{1}{2\sqrt{1+\gamma}} \begin{pmatrix} -\tilde{v}_0 \\ (\gamma+1)e^{i\varphi} \end{pmatrix} \phi_0 \\ &= \frac{1}{2\pi^{\frac{1}{4}}\sqrt{l_z(1+\gamma)}} \begin{pmatrix} -\tilde{v}_0 \\ (\gamma+1)e^{i\varphi} \end{pmatrix} \exp\left[-\frac{(\tilde{y}-\tilde{Y})^2}{2l_z^2}\right]\end{aligned}\quad (164)$$

であるから、ゼロモード間のみの遷移を考慮すると

$$\begin{aligned}&\left| \int dy \exp\left\{-ia_c \frac{e}{\hbar} B \cos\theta (\alpha^2 \sin\phi \sin\varphi + \cos\phi \cos\varphi)y\right\} \right. \\ &\quad \times \psi_0^\dagger \left(\frac{\alpha\sqrt{\gamma}}{l_z}y\right) \psi_0 \left(\frac{\alpha\sqrt{\gamma}}{l_z}(y - l_z^2\delta k)\right) \Big|^2 \\ &= \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{a_c}{l_z}\right)^2 \frac{\cos^2\theta}{\sin^2\theta} I(\phi, \alpha, \varphi, \gamma)\right]\end{aligned}\quad (165)$$

ここで、

$$\begin{aligned}I(\phi, \alpha, \varphi, \gamma) &= \gamma \left(\alpha \sin\phi \cos\varphi - \frac{1}{\alpha} \cos\phi \sin\varphi \right)^2 \\ &\quad + \frac{1}{\gamma} \left(\alpha \sin\phi \sin\varphi + \frac{1}{\alpha} \cos\phi \cos\varphi \right)^2\end{aligned}\quad (166)$$

と定義した。

ここで、ゼロモードランダウ準位の状態密度 $\rho_0(E)$ を導入する。これは $\int \rho_0(E) dE = 1$ を満たす。もし、ゼロモードのランダウ準位が不純物による散乱を受けない場合、 $\rho_0(E)$ はデルタ関数 $\delta(E)$ になる。不純物散乱を受ける場合には、図 9 のように、ローレンツ型になる。

このとき、

$$C = \int dE \rho_0(E) \left(-\frac{df}{dE} \right) \quad (167)$$

とおく。高温領域 ($k_B T \gg t_c, \Gamma$) では $C = 1/k_B T$ で与えられ、低温極限 ($T \rightarrow 0$) では $C = \rho_0(0)$ となる。ここで、 $\rho_0(0)$ は不純物散乱が十分に弱い領域 ($t_c \gg \hbar/\tau$) では $1/4t_c$ 程度であり、不純物散乱が強い領域 ($t_c \ll \hbar/\tau$) では τ/\hbar 程度である。

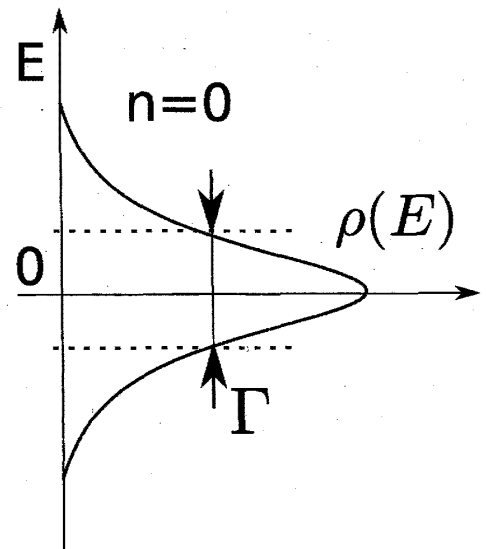


図 9: 不純物散乱がある場合のゼロモードランダウ準位の状態密度

(162) 式は、

$$\sigma_{zz}(\omega) = 2C \frac{|e|^3 t_c^2 a_c}{\pi \hbar^3} B \sin \theta \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{a_c}{l_z} \right)^2 \frac{\cos^2 \theta}{\sin^2 \theta} I(\phi, \alpha, \varphi, \gamma) \right] \frac{\tau}{1 + \omega^2 \tau^2} \quad (168)$$

とかける。

したがって、面間磁気抵抗 $\rho_{zz}^{(0)}$ は

$$\rho_{zz}^{(0)} = \frac{A}{B_0 + B \sin \theta \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{a_c}{l_z} \right)^2 \frac{\cos^2 \theta}{\sin^2 \theta} I(\phi, \alpha, \varphi, \gamma) \right]} \quad (169)$$

となる。ここで B_0 は定数であり、 $B = 0$ のときの面間抵抗は A/B_0 で与えられる。また $A = \pi \hbar^3 / 2C |e|^3 t_c^2 a_c$ は定数である。

コーンが傾きを持たず、異方性も持たない場合 ($\alpha = 1, \gamma = 1$) には $I(\phi, \alpha = 1, \varphi, \gamma = 1) = 1$ となり、面間磁気抵抗は

$$\rho_{zz}^{(0)} = \frac{A}{B_0 + B \sin \theta \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{a_c}{l_z} \right)^2 \frac{\cos^2 \theta}{\sin^2 \theta} \right]} \quad (170)$$

で与えられる。これは長田による結果 [15] と一致する。

ここで面間磁気抵抗における磁場の方向依存性について議論しよう。 $\rho_{zz}^{(0)}$ の磁場が伝導面と成す角 θ に対する依存性を図 11 に示す。磁場が面に対してほぼ垂直な場合、伝導率は $\sigma_{zz} \propto B \sin \theta$ と表される。この、 $\sin \theta$ 型の θ 依存性は、ゼロモードランダウ準位の縮退度 $1/2\pi l_z^2 = eB_z/2\pi\hbar$ の寄与によるものである。ディラック電子系は、磁場中では図 10 のように、 $n = 0$ のゼロモードランダウ準位がコンタクトポイントに出現するため、フェルミ準位における状態密度が増加する。一方、通常の二次元電子系においては、そのような状態密度の増加は起こらない。したがって、伝導率が $\sin \theta$ 型の磁場方向依存性は、その系がディラック電子系であることを示している。伝導率の θ 依存性は、この縮退度によってほぼ記述されるため、ディラックコーンの傾きの効果を調べるには不適切である。一方で、磁場が面に対して垂直でない領域において ϕ 依存性を調べると、ディラックコーンの傾きによる効果が現れる。 $\rho_{zz}^{(0)}$ における ϕ 依存性を $\alpha = 1$ と固定し、傾きの大きさ \tilde{v}_0 を変化させたものを図 12 に示した。一方、 $\tilde{v}_0 = 0$ と固定し、異方性 α を変化させたものを図 13 に示した。また、 θ の値を変えた場合における ϕ 依存性を図 14 に示した。

これらの異方性は、以下で述べる 2 つの要因によって起こる。一つは、隣り合う伝導層をホッピングする際、ローレンツ力により運動量が変化する寄与である。もう一つは、波動関数の位相差と、ディラックコーンの傾きによるランダウ準位波動関数の局在性の変化による効果である。(166) 式の右辺第一項がローレンツ力による運動量変化による面間磁気抵抗への寄与を表わし、その係数は $\gamma \leq 1$ 、第二項が波動関数の位相差による寄与を表わし、その係数は $1/\gamma \geq 1$ となることがわかる。したがって、傾いたディラックコーンにおける面間磁気抵抗の異方性において主要な寄与は波動関数の位相差によるものである。ランダウ準位の計算において、面内磁場成分は (119) 式のゲージ変換によって取り扱ったが、これは z 依存性を持つため、図 15(a) のように、隣合う伝

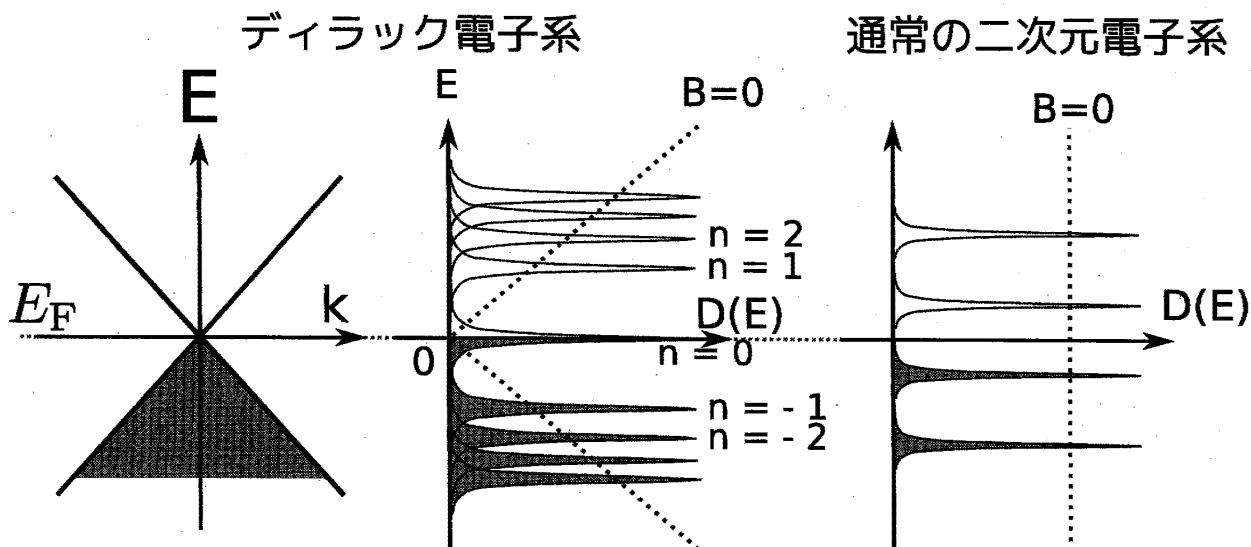


図 10: ディラック電子系および通常の二次元電子系における磁場中での状態密度。破線はゼロ磁場での状態密度を表す。

導面同士を電子がホッピングする際、それぞれの面における波動関数同士の位相差によって変調を受ける。また、3.3 節で述べたように、ディラックコーンの傾きによりゼロモードランダウ準位波動関数は、傾きの方向の局在性が強まり、垂直な方向の局在性が弱まる。ここで簡単のため面内磁場が x 方向を向いていると仮定する。また、中心座標 Y について対角化、すなわち x 方向の運動量を保存量とする。図 15(b1) のように、 k_x 方向にコーンが傾いた場合には y 方向の局在性が弱まり、位相因子の効果が大きくなるため伝導率が小さくなる。一方、図 15(b2) のように、 k_y 方向にコーンが傾いた場合には y 方向の局在性が強まり、位相因子の効果が小さくなるため伝導率が大きくなる。以上より、層間伝導率は面内磁場が傾きの方向を向くときに最小値を取り、層間抵抗は最大値を取ることがわかる。

2.2 節において述べたように、小林らは a -軸方向の一軸性圧力 $P_a = 4.5$ kbar において傾いたワイル方程式のパラメータを見積もった [10]。これらの値を用いると、 $\varphi = -31.6$ 度、 $\tilde{v}_0 = 0.92$ 、 $\gamma = 0.40$ 、 $\alpha = 1.18$ 、 $\phi_0 = 32.6$ 度と求まる。この値における層間磁気抵抗を図 16 に示した。

実験的に、傾きの方向を決定する方法を述べる。傾きによらない異方性が小さい $\alpha \simeq 1$ と仮定しよう。このとき、層間磁気抵抗における異方性の主な原因はコーンの傾きによるものである。 $\alpha = 1$ とすると、 I は

$$I(\phi, \alpha = 1, \varphi, \gamma) = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\gamma} + \gamma \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\gamma} - \gamma \right) \cos 2(\phi - \varphi) \quad (171)$$

と書ける。この式より、層間抵抗は面内磁場の方向 ϕ が傾きの方向 φ を向いているときに最大値を取ることがわかる。したがって、 φ の近似値は、最大値を取る磁場の向きより得られることがわかる。その他の値 α, γ については、次のようにして求められる。まず、パラメータ A, B_0 の値を層間磁気抵抗 $\rho_{zz}^{(0)}$ の角度 θ 依存性より決定する。(171) 式より求めた φ, γ の近似値と、 $\alpha = 1$ を初期値として最小二乗法を行なうことで、より正確な値を求めることができる。

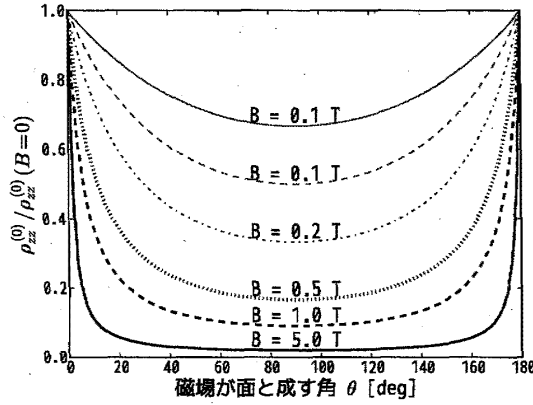


図 11: 層間磁気抵抗の θ に対する依存性。磁場の強さ B を変えて示した。ここで層間距離 $a_c = 1.75$ nm および $B_0 = 0.1$ T とした。

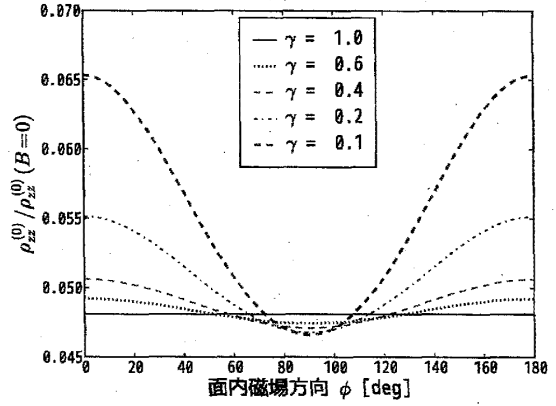


図 12: 層間磁気抵抗の面内磁場方向 ϕ に対する依存性。傾きの大きさのパラメータ γ を変えて示した。ここで、 $B = 6$ T, $\theta = 20$ degree で $\alpha = 1$ ($v_x = v_y$) とした。その他のパラメータは図 11 と同様である。

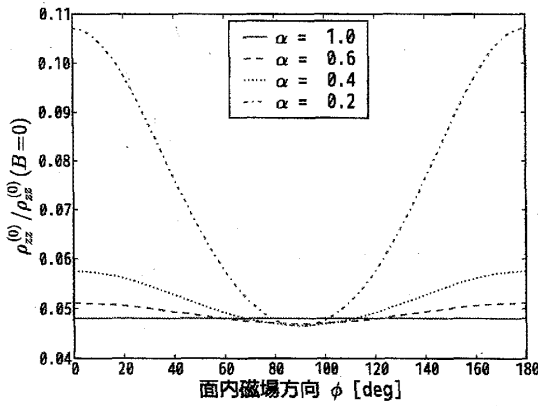


図 13: 層間磁気抵抗の面内磁場方向 ϕ に対する依存性。傾きが無い場合 $\gamma = 1$ について α を変えて示した。その他のパラメータは図 11 と同様である。

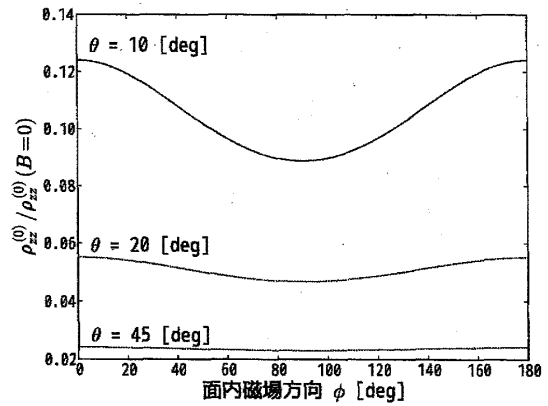


図 14: 層間磁気抵抗の面内磁場方向 ϕ に対する依存性。 $\gamma = 0.5$, $\alpha = 1$ のとき θ を変えて示した。その他のパラメータは図 11 と同様である。

ここで、(169) 式の適用可能な条件について考察する。この式はゼロモードランダウ準位間以外の遷移が起こらないと仮定して導出されている。したがって、この近似が成り立つためには、面直方向の磁場 B_z が十分強い必要がある。 $n = 1$ ランダウ準位は $E_1 \simeq 40\sqrt{B_z}K$ で表わされる。ここで B_z はテスラを単位とし、フェルミ速度は $v_F \simeq 10^5 m/s$ と仮定した [14]。したがって、温度が E_1 より十分に小さい場合には、異なる準位間の遷移の寄与が無視できると考えられる。また、磁場が伝導面となす角度 θ に対しては、この条件は $40\sqrt{B \sin \theta} > k_B T$ である。

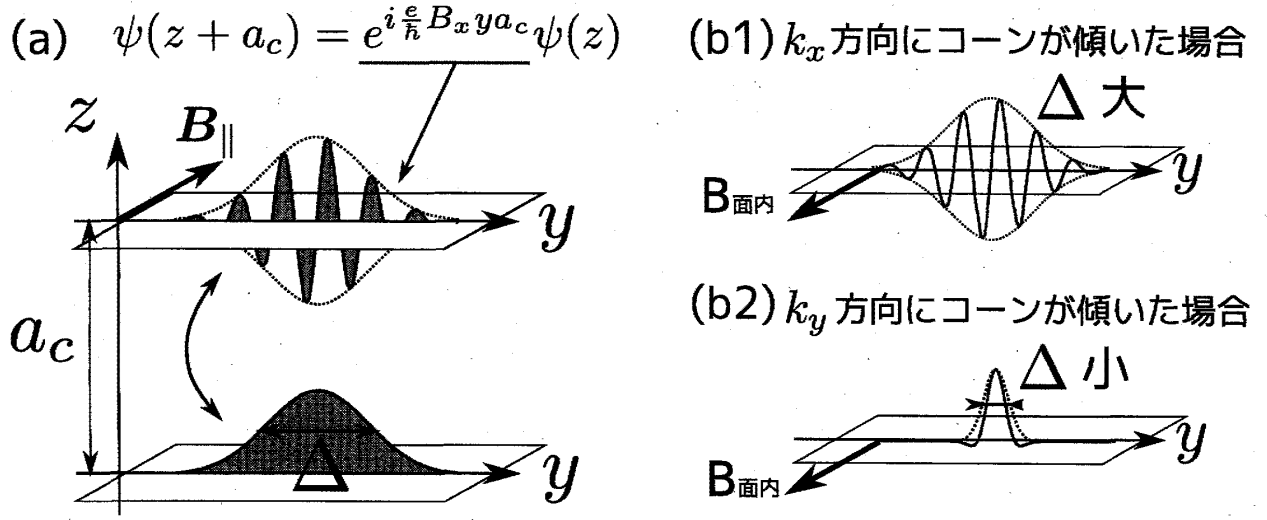


図 15: 面間磁気抵抗に表われる面内磁場方向依存性の起源。中心座標 Y を対角化した場合

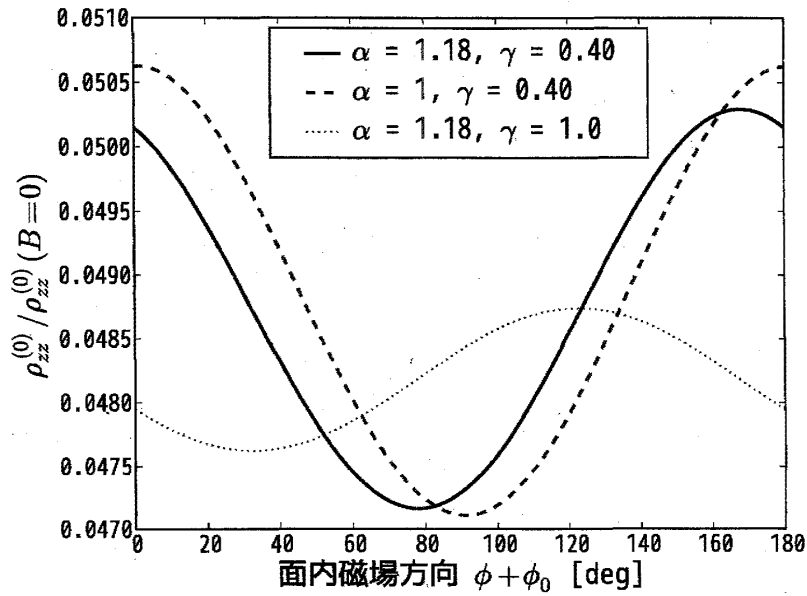


図 16: 層間磁気抵抗の面内磁場方向 ϕ に対する依存性 [23]。小林らによって $P_a = 4.5$ kbar において推定されたパラメータを用いた [10]。他のパラメータは $B = 6$ T, $B_0 = 0.1$ T, および $\theta = 20$ degree である。

5 結論

理論的に示唆されている α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ の傾いたディラックコーンをどのように検証するかという問題について、傾いたワイル方程式におけるランダウ準位波動関数を解析的に求め、層間磁気抵抗を久保公式を用いて計算した。

ディラックコーンの傾きがランダウ準位波動関数の存在確率密度に及ぼす効果を調べるため、対称ゲージにおいて波動関数を求めた結果、ゼロモードランダウ準位波動関数において、電子の存在確率密度は傾きを持たない場合と同じく局在しているが、傾きの効果により、確率密度のピークの形状が円形から楕円形に変化することがわかった。存在確率密度の広がり、(56) 式で定義された γ を用いて書くと、ディラックコーンの傾いている方向には $\sqrt{\gamma}$ だけ狭まり、それと直交する方向には $\frac{1}{\sqrt{\gamma}}$ だけ広がることがわかった。また、高次のランダウ準位に対して、ディラックコーンの傾きはゼロモードランダウ準位の存在確率密度の中心をシフトする働きを持つことがわかった。

求めたランダウ準位波動関数を用いて、傾いた異方的ディラックコーンを持つ擬二次元電子系における層間磁気抵抗を解析的に計算した。ゼロモード間のホッピングの寄与を調べ、面内磁場の方向が傾きの方向を向いているときに、層間抵抗が最大値を取ることがわかった。この異方性が現れる原因は、隣り合う層間におけるホッピング過程で面内磁場の存在によって波動関数の中心がずれるため、上記のランダウ準位波動関数の異方性の影響を受けるためである。

したがってディラックコーンの傾きの方向は、層間磁気抵抗における磁場の方位角依存性より調べることができる。本研究で導出した式を用いることで、傾いた異方的ディラックコーンのパラメータを求めることができると考えられる。

次にここで得た結果を踏まえ、今後の課題について述べる。 α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ の特長は圧力によって系が制御できることである。圧力を変えることで、2章で議論した強束縛モデルのホッピングパラメータが変化し、結果としてディラックコーンの傾きが変化する。このディラックコーンの傾きの圧力依存性については、本研究で得た面間磁気抵抗の表式を用いることで調べることができる。

一方で圧力を変えると Brillouin ゾーン内での valley 間距離が変化する。不純物散乱効果は valley 間距離に大きく依存する。面間磁気抵抗の表式の適用によって決められるディラックコーンのパラメータから valley 間距離が決定できるかどうかは明らかでないが、少なくとも valley 間距離をパラメータとして不純物散乱効果を詳細に調べることができると予想される。不純物散乱効果についてはグラフェン系でも盛んに議論されている問題であり、 α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ の特長を生かした成果が期待できる。

さらに圧力によって電荷不均化も影響を受ける。電荷不均化はディラックフェルミオンにおけるギャップ生成と関連しているので、ギャップを取り入れた面間磁気抵抗の表式を導出し、ギャップのあるディラックコーンのパラメータを決めることで、電荷不均化の変化による系のクロスオーバーもしくは相転移を議論できる可能性がある。

これらの考察をもとに、有機物質における常圧下でのディラック電子系物質探索の指針を示す

ことが目標となる。

謝辞

基礎物理学研究所に来て二年間いろいろな方にお世話になりました。ここで改めて御礼を申し上げます。遠山貴己先生、森成隆夫先生には、本研究を行なうにあたり、テーマの設定から研究方針について直接ご指導頂き、また、発表原稿などプレゼンテーションの仕方についても細かく、とても行き届いた指導をして頂きました。大変お世話になりました。また、戸塚圭介先生、早川尚男先生、和田浩史先生には研究や学生生活に対する様々なアドバイスを頂きました。心より感謝申し上げます。

また、植田浩明さん、義積広幸さんには研究室の先輩としてさまざまな面で参考にさせていただきました。ありがとうございます。

西野貴博さん、田中義晴さん、中島千博さん、三森隆広さん、黒岩健くんにはいつも楽しいお話をしてくださいました。また、昨年同室だった、青井順一さん、小川軌明さん、山内大介さん、大木洋さん、中井雄一郎さん、成子篤さん、三角樹弘さん、高力麻衣子さんには大変お世話になりました。皆様方の協力なくして研究生活は成り立たなかったと思います。ここで感謝の意を述べたいと思います。

最後に、いつも温かい目で見守ってくれた両親に感謝します。これからもよろしくお願いします。

参考文献

- [1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, *Science* **306**, 666 (2004).
- [2] Y. Zhang, Y.-W. Tan, H. L. Stormer, and P. Kim, *Nature* **438**, 201 (2005).
- [3] K. Novoselov, A. Geim, S. Morozov, D. Jiang, M. Katsnelson, I. Grigorieva, S. Dubonos, and A. Firsov, *Nature* **438**, 197 (2005).
- [4] A. Kobayashi, S. Katayama, K. Noguchi, and Y. Suzumura, *Journal of the Physical Society of Japan* **73**, 3135 (2004).
- [5] S. Katayama, A. Kobayashi, and Y. Suzumura, *Journal of the Physical Society of Japan* **75**, 054705 (2006).
- [6] T. Ishiguro and G. S. Kunihiro Yamaji, *Organic Superconductors*, 2nd ed. (Springer-Verlag, Berlin, 1998).
- [7] H. Seo, C. Hotta, and H. Fukuyama, *Chemical Reviews* **104**, 5005 (2004).

- [8] N. Tajima, M. Tamura, Y. Nishio, K. Kajita, and Y. Iye, *Journal of the Physical Society of Japan* **69**, 543 (2000).
- [9] N. Tajima, A. Ebina-Tajima, M. Tamura, Y. Nishio, and K. Kajita, *Journal of the Physical Society of Japan* **71**, 1832 (2002).
- [10] A. Kobayashi, S. Katayama, Y. Suzumura, and H. Fukuyama, *Journal of the Physical Society of Japan* **76**, 034711 (2007).
- [11] H. Kino and T. Miyazaki, *Journal of the Physical Society of Japan* **75**, 034704 (2006).
- [12] Y. Zhang, Y.-W. Tan, H. L. Stormer, and P. Kim, *Nature* **438**, 201 (2005).
- [13] S. Y. Zhou, G. H. Gweon, J. Graf, A. V. Fedorov, C. D. Spataru, R. D. Diehl, Y. Kopelevich, D. H. Lee, S. G. Louie, and A. Lanzara, *Nature Physics* **2**, 595 (2006).
- [14] N. Tajima, S. Sugawara, R. Kato, Y. Nishio, and K. Kajita, *Physical Review Letters* **102**, 176403 (2009).
- [15] T. Osada, *Journal of the Physical Society of Japan* **77**, 084711 (2008).
- [16] R. Kondo, S. Kagoshima, and J. Harada, *Review of Scientific Instruments* **76**, 093902 (2005).
- [17] T. Takahashi, *Synthetic Metals* **133-134**, 261 (2003), proceedings of the Yamada Conference LVI. The Fourth International.
- [18] S. Moroto, K.-I. Hiraki, Y. Takano, Y. Kubo, T. Takahashi, H.M. Yamamoto, and T. Nakamura, *Journal de Physique IV (Proceedings)* **114**, 399 (2004).
- [19] H. Seo, *Journal of the Physical Society of Japan* **69**, 805 (2000).
- [20] A. Kobayashi, S. Katayama, and Y. Suzumura, *Journal of the Physical Society of Japan* **74**, 2897 (2005).
- [21] C. Herring, *Physical Review* **52**, 365 (1937).
- [22] N. H. Shon and T. Ando, *Journal of the Physical Society of Japan* **67**, 2421 (1998).
- [23] T. Morinari, T. Himura, and T. Tohyama, *Journal of the Physical Society of Japan* **78**, 023704 (2009).